

引用信息: LI Zhang-Peng, XING Yong-Heng, ZHANG Yuan-Hong, BAI Feng-Ying, ZENG Xiao-Qing, GE Mao-Fa. Acta Phys. -Chim. Sin., 2009, 25(04): 741-746 [李章朋 邢永恒 张元红 白凤英 曾小庆 葛茂发. 物理化学学报, 2009, 25(04): 741-746]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

蝎型钒氧苯甲酸配合物的合成、结构及量化计算

李章朋 邢永恒 张元红 白凤英 曾小庆 葛茂发

辽宁师范大学化学化工学院, 辽宁 大连 116029; 中国科学院化学研究所, 北京 100190

摘要:

设计合成了两种以聚吡唑硼酸盐、苯甲酸为配体的钒氧配合物VO[HB(pz)3](pzH)(C6H5COO)(1)和VO[HB(3,5-Me2pz)3](3,5-Me2pzH)(C6H5COO)(2)((HB(pz)3: 聚吡唑硼酸钠盐; pzH: 吡唑; HB(3,5-Me2pz)3: 聚甲基吡唑硼酸钠盐; 3,5-Me2pzH: 3,5-二甲基吡唑). 通过元素分析、红外光谱和X射线单晶衍射方法对配合物进行了表征. 并结合从头计算结果进一步分析了配合物的稳定性及分子中配键的共价特征. 分析结果表明, 配合物2的稳定性大于配合物1, 中心钒原子周围的价键类型都属于共价键范畴, 键序分析结果与晶体结构测定的键长结果是一致的.

关键词: 钒氧配合物 聚吡唑硼酸盐 晶体结构 量子化学

收稿日期 2008-10-31 修回日期 2008-12-15 网络版发布日期 2009-01-13

通讯作者: 邢永恒 Email: yhxing2000@yahoo.com

本刊中的类似文章

1. 张宝丽;邢永恒;葛茂发;孙政;李章朋;韩晶;牛淑云.含有羧基配体的蝎型钒氧配合物的合成、结构及其热分解动力学[J].物理化学学报, 2007,23(11): 1701-1706

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1411KB)

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

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 钒氧配合物

▶ 聚吡唑硼酸盐

▶ 晶体结构

▶ 量子化学

本文作者相关文章

▶ 李章朋

▶ 邢永恒

▶ 张元红

▶ 白凤英

▶ 曾小庆

▶ 葛茂发