

## [Co(pema)(amp)Cl]<sup>2+</sup>体系一面式异构体的结构解析及其优势构型

祝黔江,陶朱,张建新,张广义,罗绪强,周忠远,周向葛

贵州大学基础部;贵州大学应用化学研究所;贵州省天然产物重点化学实验室;中国科学院成都有机化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 仅合成得到[Co(pema)(amp)Cl]<sup>2+</sup>体系配合物的一个面式异构体(pema=N-(2-吡啶甲基)乙二胺, amp=2-甲氨基吡啶). 利用二维核磁共振技术与单晶X-ray衍射法平行解析了该异构体的结构. 结果显示结构中存在C—H... $\pi$ 相互作用. 用

RHF/LANL2DZ对该体系可能的异构体进行结构、能量优化, 可能形成C—H... $\pi$ 相互作用的异构体具有较好的稳定性. C—H... $\pi$ 相互作用对含吡啶环的[CoN5Cl]<sup>2+</sup>系

配合物的异构体的选择性形成及其稳定性具有重要作用.

**关键词** [钴络合物](#) [异构体](#) [吡啶](#) [P](#) [核磁共振谱法](#) [X射线衍射分析](#) [乙二胺](#) [P](#) [稳定性](#)

分类号 [0614](#)

## Assignment and Configuration Preference of a Fac-isomer in the [Co (pema)(amp)Cl]<sup>2+</sup> System

Zhu Qianjiang, Tao Zhu, Zhang Jianxin, Zhang Guangyi, Luo Xuqiang, Zhou Zhongyuan, Zhou Xiangge

Department of Basic Courses, Guizhou University; Institute of Applied Chemistry, Guizhou University; Key Laboratory of Chemistry for Natural Products of Guizhou Province; Chengdu Institute of Organic Chemistry, Chinese Academy of Sciences

**Abstract** Only one fac isomer was synthesized in the [Co(pema) (amp) Cl]<sup>2+</sup> system (pema=  $\gamma$ -pyridin-2-ylmethyl-ethane-1,2-diamine, amp = 2-aminomethylpyridine). This isomer was assigned by using 2D NMR technique and single crystal X-ray diffraction analysis. The results show that C-H... $\pi$  interaction exists in the title isomer. A computational result of RHF/LANL2DZ optimized structure and total energy shows that the isomers with C H... $\pi$  structure have lower total energy, and that stability and isomeric preference of isomer are related to the C H... $\pi$  interaction in the isomer.

**Key words** [COBALT COMPLEX](#) [ISOMER](#) [PYRIDINE](#) [P](#) [NMR](#) [XRD](#) [ETHANEDIAMINE](#) [P](#) [STABILITY](#)

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“钴络合物”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [祝黔江](#)
- [陶朱](#)
- [张建新](#)
- [张广义](#)
- [罗绪强](#)[周忠远](#)[周向葛](#)