



吡唑衍生物的铜和银配合物的合成、结构及光谱研究
Synthesis, Structure and Spectrum Study of Copper and Silver Complexes of Pyrazole Derivative

摘要点击: 101 全文下载: 53

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

中文关键词: [铜配合物](#) [银配合物](#) [吡唑衍生物](#) [合成](#) [结构](#) [光谱](#)

英文关键词: [copper complex](#) [silver complex](#) [pyrazole derivative](#) [synthesis](#) [structure](#) [spectrum](#)

基金项目:

作者	单位
王欣羽	辽宁师范大学化学化工学院, 大连 116029
李 桢	昆士兰大学生物工程及纳米科技学院功能纳米材料研究中心, 布里斯班 4072, 澳大利亚
孙 巧	昆士兰大学生物工程及纳米科技学院计算分子科学研究中心, 布里斯班 4072, 澳大利亚
白凤英	辽宁师范大学生命科学学院, 大连 116029
邢永恒	辽宁师范大学化学化工学院, 大连 116029

中文摘要:

在有机溶剂中, 我们设计合成了4种配合物: $[\text{Cu}_2\text{Cl}_4\text{pz}^*_2]$ (1), $[\text{Cu}_2\text{Cl}_4(\text{L}_2)_2]$ (2), $[\text{CuCl}(\text{L}_2)_2\text{H}_2\text{O}]\text{Cl}\cdot\text{H}_2\text{O}$ (3), $[\text{Ag}(\text{L}_3)_2]\text{NO}_3$ (4) ($\text{pz}^*=3, 5$ -二甲基吡唑; L_2 =二吡唑甲烷; $\text{L}_3=4$ -碘-3,5-二甲基吡唑)。通过元素分析、红外光谱、紫外光谱、X-ray粉末和X-ray单晶衍射方法对其结构进行了表征, 分析了其光谱及结构特征。结构分析表明, 吡唑烷均采取二齿配位模式, 配合物1、3和4中金属的配位数分别为五、六和二; 配合物2中则存在2种不同配位模式的中心铜离子。并用Gaussian03量子化学程序包, 采用密度泛函理论(DFT)中的B3LYP方法, 研究了3个铜配合物的稳定性和电荷分布。

英文摘要:

Four complexes $[\text{Cu}_2\text{Cl}_4\text{pz}^*_2]$ (1), $[\text{Cu}_2\text{Cl}_4(\text{L}_2)_2]$ (2), $[\text{CuCl}(\text{L}_2)_2\cdot\text{H}_2\text{O}]\text{Cl}\cdot\text{H}_2\text{O}$ (3) and $[\text{Ag}(\text{L}_3)_2]\text{NO}_3$ (4) ($\text{pz}^*=3, 5$ -dimethyl-1*H*-pyrazole, L_2 =di(1*H*-pyrazol-1-yl)methane, $\text{L}_3=4$ -iodo-3,5-dimethyl-1*H*-pyrazole) were designed and synthesized in the organic solvent system. The spectrum and structural characters of the four complexes were analyzed by elemental analysis, IR spectrum, UV spectrum, X-ray powder and X-ray monocrystal diffraction technology. The structural analysis shows that all pyrazolidines are in bidentate coordination mode and the coordination numbers of metal in complexes 1, 3 and 4 are five, six and two, respectively. However, there are two coordination modes for copper in complex 2. Furthermore, The stabilities and charge distribution of the three copper complexes were calculated by quantum chemistry. CCDC: 833603, 2: 833604, 4.

您是第1114374位访问者

主办单位: 中国化学会 单位地址: 南京大学化学楼

服务热线: (025)83592307 传真: (025)83592307 邮编: 210093 Email: wjhx@netra.nju.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计