

## CIS-双(氯乙酸)-2,3-二甲基-2,3-丁二胺合铂配合物的晶体结构和电子结构

曲筠,唐雯霞,戴安邦,王凤山,郭东耀

南京大学配位化学研究所;吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 测定了CIS-双(氯乙酸)-2,3-二甲基-2,3-丁二胺合铂,CIS-[PtDMBA(CICH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>]配合物的晶体和分子结构。晶体的空间群为P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>。晶胞参数a=9.866(4)Å,b=16.356(2)Å,c=19.501(4)Å;Z=8。由Patterson函数导出Pt原子坐标参数,Fourier和差值Fourier电子密度函数法得到全部非氢原子坐标参数,用块矩阵最小二乘法精修所有的结构参数,最终一致性因子r值为0.061。每个分子中,Pt(II)取四配位平面四边形构型。DMBA以及双齿与Pt(II)螯合成五元环。分子中N-Pt-N和O-Pt-O的平均键角分别为80.3°和80.8°。由于DMBA螯合配位,使平面正方形畸变,与Pt配位的两个氯乙酸根的键合原子间距离为2.6Å。用CNDO/2方法研究了配合物电子结构,解释了配合物具有较特殊的O-Pt-O,N-Pt-O-键角的原因,并讨论了配合物的结构与抗癌活性间的关系。

**关键词** [晶体结构测定](#) [抗癌药](#) [丁二胺 P](#) [铂络合物](#) [微分重叠全忽略近似](#) [结构与性能关系](#) [氯乙酸 P](#) [电子结构](#)

分类号 [0611.662](#)

## Crystal structure and electronic structure of cis-bis(chloroacetato)-2,3-dimethyl-2,3-butanediaminoplatinum

QU YUN,TANG WENXIA,DAI ANBANG,WANG FENGSHAN,GUO DONGYAO

### Abstract

**Key words** [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [ANTICARCINOGEN](#) [BUTANEDIAMINE P](#) [PLATINUM COMPLEX](#) [CNDO APPROXIMATION](#) [STRUCTURE AND PROPERTY CORRELATION](#) [CHLOROACETIC ACID P](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#)

DOI:

通讯作者

### 扩展功能

#### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(OKB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)
- ▶ [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“晶体结构测定”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [曲筠](#)
- [唐雯霞](#)
- [戴安邦](#)
- [王凤山](#)
- [郭东耀](#)