

铁铂硫原子簇化合物的合成与结构研究 V: [MoFe3S4]类立方烷簇化合物的转化反应和[Et4N]3[Mo2Fe6S8(SC6H4CH3-m)3Cl6]的晶体结构

康北笙,蔡进华,吴达旭,刘汉钦,刘秋田,翁林红,卢嘉锡

中国科学院福建物质结构研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 具[MoFe2S4]类立方烷结构单元的双类立方烷化合物[Et4N]4[Mo2Fe7S8(SR)12](1a,R=Ph; 1b, R=tolyl-m)或单类立方烷化合物[MoFe3S4(dtcR2)5](2a, R=Me; 2b, R=Et)与酰氯在乙腈中反应,分别得到不含Fe桥的双类立方烷化合物(Et4N)3[Mo2Fe6S8(SR)3Cl6](3a, R=Ph; 3b, R=tolyl-m)与[MoFe3S4]骨架支解后的Fe(dtcR2)2Cl(4a, R=Me; 4b, R=Et)。说明在相同反应条件下, [MoFe3S4]单元在1中比在2中稳定,本文首次将1型与3型结构通过一步化学反应联系起来。3型化合物的产生得到X射线衍射测定及¹H NMR谱的证实。本文报道3b的单晶结构及3的¹H NMR数据, 3b属六方晶系, P63/m, a=1.6827(3), c=1.5951(16)nm; V=3.91158nm³; Dc=1.491g/cm³; Z=2; F(000)=1780; 偏离因子R=0.048, 化合物2与酰氯反应产生4, 由红外及紫外可见光谱证实。

关键词 [晶体结构测定](#) [X射线衍射分析](#) [转化](#) [铁络合物](#) [四氢呋喃](#) [固氮酶](#) [钼络合物](#) [簇状化合物](#) [硫络合物](#) [立方烷](#) [乙腈](#)

分类号 [0611.662](#) [074](#)

Synthesis and structural studies of Mo-Fe-S compounds V: Transformation of cluster skeletons of compounds with [MoFe3S4] unit and crystal structure of [Et4N]3[Mo2Fe6S8Cl6(SC6H4CH3-m)3]

KANG BEISHENG, CAI JINHUA, WU DAXU, LIU HANQIN, LIU QIUTIAN, WONG LINHONG, LU JIAXI

Abstract Dicubane clusters [Et4N]4[Mo2Fe7S8(SR)12] (I; R = Ph, m-tolyl) of monocubane clusters [MoFe3S4(dtcR2)5] (II; R = Me, Et) reacted with AcCl in MeCN to give the dicubanes [Et4N]3[Mo2Fe6S8Cl6(SR)3] (III; R = Ph, m-tolyl) without bridging Fe atom and Fe(dtcR2)2Cl (IV; R = Me, Et) without the [MoFe3S4] skeleton, resp. These reactions indicate that under similar reaction conditions, the [MoFe3S4] cubane-like unit is more stable in I than in II. For the first time correlated structure I was correlated with structure III by chem. reactions. Single crystal of III (R = m-tolyl) is hexagonal, space group P63/m, a 1.6827(3), c 1.5951(16) nm; Z = 2; dc = 1.491 g/cm³; F(000) = 1780, for 1296 unique data, R = 0.048. The spectral data of III and IV are reported.

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [EVOLUTIONS](#) [IRON COMPLEX](#) [TETRAHYDROFURAN](#) [NITROGENASE](#) [MOLYBDENUM COMPLEX](#) [CLUSTER COMPOUND](#) [SULFIDE COMPLEX](#) [CUBANE](#) [ACETONITRILE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(508KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“晶体结构测定”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [康北笙](#)
- [蔡进华](#)
- [吴达旭](#)
- [刘汉钦](#)
- [刘秋田](#)
- [翁林红](#)
- [卢嘉锡](#)