

研究论文

类晶加合物(M=Co, Cu, Ni)的晶体结构及分子间相互作用的理论研究

白娟, 王果, 张莉, 王超, 黄元河, 方德彩, 李奇

北京师范大学化学学院, 北京 100875

收稿日期 2006-5-30 修回日期 网络版发布日期 2007-6-6 接受日期

摘要 合成了3种化合物 $[2\text{-ClPyH}]_2\text{CoCl}_4$ (1), $[2\text{-ClPyH}]_2\text{NiCl}_4$ (2)和 $[2\text{-ClPyH}]_2\text{CuCl}_4$ (3), 单晶X射线衍射法晶体结构测定结果表明, 这3种化合物是同形加合物, 在它们的结构中, $[2\text{-ClPyH}]^+$ 离子呈平面状, 而 $[\text{MCl}_4]^{2-}$ 离子为变形的四面体. 晶体结构分析发现晶体中存在 $\text{N—H}\cdots\text{Cl}$ 和 $\text{C—H}\cdots\text{Cl}$ 氢键, 以及 $\text{Cl}\cdots\text{Cl}$ 分子间相互作用和 $\pi\text{-}\pi$ 堆积作用. 对自由状态下独立的配位离子进行的几何构型优化, 以及三维周期性条件下几何结构优化的量子化学计算结果表明, 标题化合物中具有方向性和选择性的氢键决定延伸性结构的方向, 而相对较弱的卤素 \cdots 卤素作用在最终晶体结构的确定中扮演很重要的角色.

关键词 [加合物](#) [氢键](#) [Cl \$\cdots\$ Cl作用](#) [\$\pi\text{-}\pi\$ 堆积作用](#)

分类号 [O641.1](#)

Theoretical Study of Crystal Structures and Intermolecular Interactions in Isomorphous Adducts $[2\text{-ClPyH}]_2^+ [\text{MCl}_4]^{2-}$ (M=Co, Cu, Ni)

BAI Juan, WANG Guo, ZHANG Li, WANG Chao, HUANG Yuan-He, FANG De-Cai, LI Qi*

College of Chemistry, Beijing Normal University, Beijing 100875, China

Abstract Three complexes $[2\text{-ClPyH}]_2\text{CoCl}_4$ (1), $[2\text{-ClPyH}]_2\text{NiCl}_4$ (2) and $[2\text{-ClPyH}]_2\text{CuCl}_4$ (3) were prepared, and their crystal structures were determined with X-ray crystallography. In each of the structures, the $[2\text{-ClPyH}]^+$ cation is almost in the same plane while the $[\text{MCl}_4]^{2-}$ anion is a slightly distorted tetrahedron. The X-ray crystallography analysis indicates that ultimate structures include the hydrogen bonds $\text{N—H}\cdots\text{Cl}$ and $\text{C—H}\cdots\text{Cl}$, intermolecular $\text{Cl}\cdots\text{Cl}$ interactions as well as $\pi\text{-}\pi$ stacking interactions. The title compounds were investigated theoretically *via* crystal orbital method based on density functional theory, as self-existent anions and a structure units respectively. The hydrogen bonding determines the directions of one-dimensional infinite columns and $\text{Cl}\cdots\text{Cl}$ interactions plays a crucial role in the final structure.

Key words [Adduct](#) [Hydrogen bonds](#) [Cl \$\cdots\$ Cl interaction](#) [\$\pi\text{-}\pi\$ Stacking interaction](#)

DOI:

通讯作者 李奇 qili@bnu.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(436KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“加合物”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [白娟](#)

· [王果](#)

· [张莉](#)

· [王超](#)

· [黄元河](#)

· [方德彩](#)

· [李奇](#)