

含苯并咪唑基配体的稀土配合物的合成、结构及量子化学研究

刘迎春,马建方,阚玉和,杨进,刘景福,胡宁海,贾恒庆

东北师范大学化学学院,长春(130024);中国科学院长春应用化学研究所,长春 (130022)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 合成了未见文献报道的N, N, N', N'-四[(2-苯并咪唑)甲基]乙二胺的丁基取代衍生物(BuEDTB)与稀土硝酸盐的配合物[M(BuEDTB)(NO₃)₂].NH₃.4H₂O [M=La(1),Eu(2),Tb(3)],并用X射线衍射法测定了1的结构,晶体属三方晶系,空间群P32 21,晶胞参数a=1.41353(9)nm,c=2.6264(4)nm;V=4.5447(9)nm³,Dc=1.189g/cm³,z=3,F(000)=1686,μ=0.758nm⁻¹,R=0.0562,wR=0.1488.乙二胺上两个N原子及四个苯并咪唑各有一个N原子参与配位,两个硝酸根以双齿形式与稀土离子配位,第三个硝酸根不与金属离子配位,用ab initio HF方法研究了BuEDTB的电子结构。

关键词 [苯并咪唑 P](#) [铜络合物](#) [铈络合物](#) [铽络合物](#) [乙二胺 P](#) [X射线衍射分析](#) [晶体结构](#) [从头计算法](#)

分类号 [0614](#)

Syntheses, Crystal Structures and Quantum Chemistry Study of the Rare Earth Complexes with the Benzimidazole Derivative Ligand

Liu Yingchun, Ma Jianfang, Kan Yuhe, Yang Jin, Liu Jingfu, Hu Ninghai, Jia Hengqing

Department of Chemistry, Northeast Normal University, Changchun (130024); Changchun Institute of Applied Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Changchun(130022)

Abstract

Key words [BENZIMIDAZOLE P](#) [LANTHANUM COMPLEX](#) [EUROPIUM COMPLEX](#) [TERBIUM COMPLEX](#) [ETHANEDIAMINE P](#) [XRD](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [AB INITIO CALCULATION](#)

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“苯并咪唑 P”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [刘迎春](#)
- [马建方](#)
- [阚玉和](#)
- [杨进](#)
- [刘景福](#)
- [胡宁海](#)
- [贾恒庆](#)