

异质同晶体: 三(2-苯并咪唑亚甲基)胺合钴(II)和 锌(II)配合物的合成、结构 及量化计算

张欣,王瑾玲,郁铭,缪方明

天津师范大学教育学院;天津师范大学化学与生命科学学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 合成了三(2-苯并咪唑亚甲基)胺合钴(II)(化合物a)和三(2-苯并咪唑亚甲基)胺合锌(II)(化合物b)配合物,进行了元素分析和红外光谱表征;用单晶X射线衍射方法测定了它们的晶体结构。测定结果表明化合物a和b是一对异质同晶体,配合过程中NTB的两个N原子被去质子化,晶体属立方晶系, I-43d空间群。晶胞参数 $a=b=c=2.2353(3)\text{nm}$, $V=11.169\text{nm}^3$, $Z=16$,最终偏离因子为 $R=0.0686(a)$ 和 $0.0688(b)$ 。配合物中的金属原子与配体NTB分子中的一个烷胺氮原子、三个 sp^2 氮原子和一个水分子中的氧形成五配位的扭曲三角双锥构型。用密度泛函的方法进行了量子化学计算,结果表明NTB分子有去质子化的倾向,与配合物晶体结构测定结果(配合物中配体以NTB~2形式存在)相吻合。

关键词 [异质同晶](#) [苯并咪唑P](#) [钴络合物](#) [锌络合物](#) [元素分析](#) [红外分光光度法](#) [X射线衍射分析](#) [量子化学](#)

分类号 [0641](#)

Synthesis, structure and quantum calculation of the isomorph: Tris(2-benzimidazolymethyl)amine cobalt(II) and zinc(II) complexes

Zhang Xin,Wang Jinling,Yu Ming,Miao Fangming

Abstract Tris(2-benzimidazolymethyl)amine cobalt (II) (complex a) and tris(2-benzimidazolymethyl)amine zinc (II)(complex b) were synthesized. Their crystal structures were determined by X-ray method. Elemental analysis and IR spectra of the two title compounds were performed. The results show that complexes a and b are a pair of isomorphs. During the formation of the complexes, the two N-atoms of NTB were unprotonated. The crystals are cubic, I-43d space group, with $a=b=c=2.2353(3)\text{nm}$, $V=11.169\text{nm}^3$, $Z=16$. The final refinement converged to $R=0.0686(a)$ and $0.0688(b)$. In the two complexes, the metal atom is coordinated with one nitrogen atom of alkylamine and three sp^2 nitrogen atoms from NTB and one oxygen atom from H_2O to form a distorted trigonal-bipyramid configuration. The quantum calculation was performed by the method of density function. The results show that the NTB molecule tends to be unprotonated, which is consistent with that of the crystal structure.

Key words [ISOMORPHISM](#) [BENZIMIDAZOLE P](#) [COBALT COMPLEX](#) [ZINC COMPLEX](#) [ELEMENTAL ANALYSIS](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#)

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“异质同晶”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [张欣](#)
- [王瑾玲](#)
- [郁铭](#)
- [缪方明](#)