

铜与苯并-1,3-噻唑-2-硫酮配合物的电化学合成与 晶体结构

顾建胜,马美华,沈理明,郁开北

苏州大学理学院化学化工系;中国科学院成都分院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在苯并-1,3-噻唑-2-硫酮(Hbztzt,HL)和三苯膦(PPh~3)的乙腈溶液中,用牺牲铜阳极的电化学方法一步合成了Cu(I)的相应配合物, 电化学效率(E~f)、元素分析和IR光谱表明: 产物为同时含有硫醇阴离子(L)和中性硫酮(HL)两种配体及三苯膦的多元混合配体配合物[Cu(L)(HL)(PPh~3)]。配合物在CS~2中重结晶得淡黄色晶体, X射线单晶衍射法测定其结构为[Cu(L)(HL)(PPh~3)~2]·CS~2。晶体属三斜晶系, 空间群: P1.a=1.0159(2)nm, b=1.4200(2)nm, c=1.8072(3)nm, $\alpha=78.12(1)^\circ$, $\beta=86.56(1)^\circ$, $\gamma=67.65(1)^\circ$, Z=2, V=2.3929(6)nm³, D~c=1.41g·cm⁻³, R=0.0348, R~w=0.0316。Cu原子以变形四面体与两个PPh~3的两个P原子、被氢键(N—H...N)平均化的硫醇阴离子(L)和中性硫酮分子(HL)上的两个环外S原子配位(两个Cu—S键的键长为0.2372nm和0.2410nm)。

关键词 [铜络合物](#) [苯并噻唑P](#) [硫酮](#) [晶体结构](#) [元素分析](#) [红外分光光度法](#) [电化学合成](#)

分类号 [0646](#)

Electrochemical synthesis and crystal structure of copper(I) complex with benzo-1,3-thiozoline-2-thione

Gu Jiansheng, Ma Meihua, Shen Liming, Yu Kaibei

Abstract Complex [Cu(bztzt)(Hbztzt)(PPh~3)] was synthesized by electrochemical oxidation of copper in an acetonitrile solution of benzo-1,3-thiozoline-2-thione (Hbztzt) and triphenylphosphine (PPh~3), and characterized by elemental analysis and IR spectrum. The complex was dissolved in CS~2, from which yellow crystal formed. The structure of the crystal was shown to be [Cu(bztzt)(Hbztzt)(PPh~3)]·CS~2 by an X-ray structure determination. Crystal is triclinic, space group P1, with a=1.0159(2) nm, b=1.4200(2) nm, c=1.8072(3) nm, $\alpha=78.12(1)^\circ$, $\beta=86.56(1)^\circ$, $\gamma=67.65(1)^\circ$, Z=2. The structure was refined to R=0.0348 and R~w=0.0316 for 4869 reflections. The copper atom is pseudotetrahedrally coordinated by two P atoms from PPh~3 and two exocyclic S atoms from bztzt^- and Hbztzt ligands respectively. The ligands of bztzt^- and Hbztzt were "averaged" by the presence of hydrogen bond (N—H...N) between them. The bond distances of two Cu— S are 0.2372nm and 0.2410nm.

Key words [COPPER COMPLEX](#) [BENZOTHIAZOLE P](#) [THIOKETONE](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [ELEMENTAL ANALYSIS](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [ELECTROCHEMICAL SYNTHESIS](#)

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“铜络合物”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [顾建胜](#)
- [马美华](#)
- [沈理明](#)
- [郁开北](#)