



### 3,5-二甲基-4-碘吡唑钾配合物的合成、结构及脎化中间体结构的量化

<http://www.firstlight.cn> 2010-05-20

以乙酰丙酮为起始原料，经过脎化反应得到3-脎基戊二酮(1)，再将其与水合肼缩合环化、还原、重氮化及碘代反应合成了标题化合物。通过元素分析、红外光谱、核磁共振光谱测试技术表征了它的结构。用MP2方法，在6-311++G(d,p)基组水平上对化合物1及其可能异构体4-羟基-3-亚硝基-3-烯-1-戊酮(1b)的分子结构进行了全参数优化计算，得到了它们的平衡几何构型。探讨了脎化反应机理。利用X射线单晶衍射法测定了钾化合物的晶体结构，为单斜晶系，P21/c空间群，晶胞参数为 $a=0.77645(10)$  nm, $b=2.0361(2)$  nm, $c=1.05761(13)$  nm, $\beta=107.806(2)^\circ$ , $V=1591.9(3)$  nm<sup>3</sup>, $Z=4$ , $D_c=2.012$  g/cm<sup>3</sup>, $F(000)=904$ ,结构计算的最终偏离因子 $R1=0.0398$ 。

[存档文本](#)