

八面体配合物分子的旋光性和构型

周志华 汤杰 胡秀贞

(南京师范大学化学系)

在极化度多级圆球不对称模型(该模型运用于含一个或二个不对称碳的有机化合物)和对称性规则的基础上,我们提出了某些规则和八面体配合物的八区律。利用这些规则和规律,八面体配合物的分子构型可以方便的与它们的旋光方向联系起来。

关键词: 旋光性 分子构型 八区律

引 言

物质的结构决定物质的性质,分子的非对称结构使大量分子的集合体表现出旋光性来,具有非对称结构的配合物分子*也不例外。众所周知,研究配合物旋光性的方法很多,这里主要提及下面三种:1.在固定波长下如钠的D线(589nm),汞的绿线(546nm)]测定物质的比旋光度或摩尔旋光度。2.在一个相当宽的波长范围内(通常在包含生色团吸收带的波长范围内)测定摩尔旋光度随波长变化的曲线,称为ORD曲线。ORD曲线的特性与旋光物质的构型**、构象、生色团的性质、它相对于非对称中心的位置以及溶剂、温度等密切相关。3.在旋光吸收带附近研究由于对左、右圆偏振光吸收系数之差而形成椭圆偏振光的情况,从产生的CD曲线进一步了解旋光性物质在吸收带处的有关信息。

在配合物分子中,金属离子(或原子)有双重作用—非对称中心和生色团的作用。人们对d-d跃迁区的ORD和CD作了广泛的研究。对ORD的研究已得到下列规律:若相似化合物中相应的电子跃迁能产生相同符号的Cotton效应,则该相似化合物具有同样的光学构型。假如其中某一化合物构型已知,则其他化合物的构型可通过ORD光谱的比较而方便的推测出来。但还存在一些问题,主要是对具有重叠Cotton效应的光谱的分解存在着困难,致使判断某一旋光吸收带是否属于相应的电子跃迁变得不容易,甚至不可能^[1]。对CD的研究已把第一吸收带长波区CD的正负号与配合物的分子构型直接联系了起来^[2]。

Schellman证明一个生色团产生的旋光性,其势函数必须属于或包含未微扰时生色团相应对称群的一个准标量的对称性。这样可以不必求助于特定模型和假设生色团的电子态,建立起旋光性的局部规则^[3]。对于研究最早的在一定波长下测定物质的旋光性与分子的绝对构型能否建立起直接联系呢?这对于有大量旋光度数据的配合物是有着较大意义的。本文仅就过渡元素六配位配合物在钠的D线(少数在汞的绿线)下测定的旋光性与其构型间的关系作一探讨。

本文于1987年7月10日收到。

* 这里指的配合物分子实际上主要指配离子。

** 本文所指构型皆系绝对构型。

模 型 和 规 则

我们曾提出了不对称碳原子周围极化度的多级圆球不对称性模型,把含一个、二个不对称碳原子的有机化合物的微观结构—分子构型和其宏观性质—旋光性较好的联系起来^[4,5]。本文仍采用多级圆球不

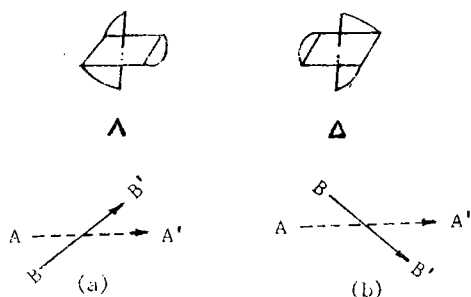


图 1 配合物的构象归属规则

Fig. 1 Configuration assignment rule for coordination compounds

对称性模型并与对称性规则结合起来讨论旋光性与分子构型间的关系。应该注意在有机物中,不对称中心大多指碳原子,它与周围原子(或基团)主要是以 σ 键相结合,呈四面体状,不存在 d 电子;而八面体配合物中不对称中心是金属离子(或原子),存在着 d 电子,它与周围配体常以配位键结合(有 σ 键、 π 键、和 $\sigma-\pi$ 授受键),所以这里的不对称性指的是配位原子产生的配位场强度的不对称性。

配合物分子构型的标记采用 IUPAC 建议的两根不正交斜线确定一个螺旋体系的法则,把含螯合环的六配位配合物的构型规定为 Λ 型和 Δ 型。如图 1 所示的(a) $[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$ 为 Λ 构型, (b) $[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$ 为 Δ 构型。

表 1 一级圆球不对称性对配合物旋光性的影响

Table 1 The Effect of the First Order Spheric Unsymetry on the Optical Activity of Coordination Compounds

coordination compounds	optical activity	solvent	ref.
(1) $\Lambda - (+)_D - [\text{Co}(\text{en})_3] \text{I}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	$+89.6^\circ$	/	[6]
(2) $(+) - [\text{Co}(-) - (\text{stien})_3] (\text{ClO}_4)_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	$+83^\circ$	0.1% methane alcohol	[7]
(3) $1 - [\text{Co}(\text{l-pn})_3] \text{I}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	-24°	/	[8]
(4) $\Lambda - (+)_D - \text{cis} - [\text{Co}(\text{en})_2 \text{Cl}_2] \text{Cl}$	$+629^\circ$	/	[9]
(5) $(+) - [\text{Ru}(\text{phen})_2 \text{bipy}] (\text{ClO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	$+1120^\circ$	water	[10]

note: $\text{en} = \text{H}_2\text{NCH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$, $\text{pn} = \begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH}_2 \\ | \quad | \\ \text{NH}_2 \quad \text{NH}_2 \end{array}$, $\text{stein} = \begin{array}{c} \text{Ph} \quad \text{C} = \text{C} \quad \text{Ph} \\ | \quad | \\ \text{NH}_2 \quad \text{NH}_2 \end{array}$

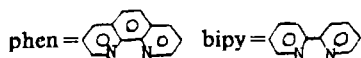


图 2 $[\text{Co}(\text{penten})]^{3+}$ 的空间构型Fig. 2 A space configuration of the $[\text{Co}(\text{penten})]^{3+}$

根据上述法则, 构型为图 2 的 $[\text{Co}(\text{penten})]^{3+}$ 应属 Δ 构型, 因环对间的关系以左手螺旋为主. 具体规则: 1. 按照多级圆球不对称模型考虑, 在配合物中同样是第一级圆球配位场的

表 2 外界离子的存在对配合物旋光性的影响

Table 2 The Effect of Out Sphere Ions on the Optical Activity of Coordination Compounds

coordination compounds	$[\alpha]$	solvent	ref.
(1) $\Delta - (+)_{546} - \text{K} - [\text{Co}(\text{ox})_2(\text{gly})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ $\Delta - (+)_{546} - \text{Ba} - [\text{Co}(\text{ox})_2(\text{gly})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	$[\alpha]_{546} + 7810^\circ$ $[\alpha]_{546} + 8100^\circ$	/	[6]
(2) $\Delta - (-)_D - [\text{Co}(\text{en})_2(\text{N-Me}-(\text{s})-\text{ala})]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ $\Delta - (-)_D - [\text{Co}(\text{en})_2(\text{N-Me}-(\text{s})-\text{ala})]\text{I}_2$	$[\alpha]_D - 632$ $[\alpha]_D - 408$	/	[11]

note: ala = $\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{CHNH}_2 \\ | \\ \text{COOH} \end{array}$

不对称性影响最大, 即与中心原子(过渡金属离子或原子)直接相联结的原子作为第一级圆球. 配位原子场强的大小可参考光化学序, 如同为 N 原子, 则乙二胺中的 N 比 NH_3 中的 N 来得强. 在 $[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$ 中 $[\text{CoN}_6]^{3+}$ 作为第一级圆球考虑. 配位原子间配位场强度相差愈大(或不对称程度愈大)则配合物的旋光性愈大.



图 3 八区标志

Fig. 3 Signs for octant

序为 > 两者配位原子的配位场强度相差较大, 所以有较大的旋光性.

在表 1 中, 前三个化合物均有三个相同的双齿配体, 在第一级不对称圆球中, 六个配位原子的配位场强度相差较小, 故其旋光性较小, 而配合物(4)是由 $\Delta - (+) - [\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$ 中的一个 en 被两个 Cl^- 离子取代所得, 配体有两种, 第一级不对称圆球中, 配位原子配位场强度相差较大, 故有较大的旋光性, 对配合物(5)存在着共轭体系, 配位场强度与共轭体系大小有关, 其顺

2.外界离子的存在对配合物的旋光性有一定影响,但不改变其旋光符号。

外界离子之所以对配合物的旋光性有一定的影响,是因为外界离子不仅与配合物中心离子之间存在着相互作用,使中心离子周围电子云的分布变化不同,例如(1)中的 Ba^{2+} 的电场强于 K^{+} 的电场,故 Ba^{2+} 对中心离子电子云分布影响较 K^{+} 为大,所以配合物的旋光性是钡盐大于钾盐。

表3 相同配体的双齿六配位配合物的旋光性

designation	configuration	$[\alpha]_D$	judgement	ref.
$D - [\text{Co}(\text{d-pn})_3] \text{I}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$		$+24^\circ (0.1\% \text{CH}_3\text{OH})$	+	(8)
$D - [\text{Co}(\text{l-pn})_3] \text{I}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$		$+214^\circ$	+	(8)
$L - [\text{Co}(\text{d-pn})_3] \text{I}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$		-214°	-	(8)
$L - [\text{Co}(\text{l-pn})_3] \text{I}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$		-24°	-	(8)
$(+) - [\text{Ru}(\text{phen})_2 \text{bipy}] \text{ClO}_4$		$+1120^\circ (\text{water})$	+	(10)
$(+) - [\text{Ru}(\text{phen})_2 \text{bipy}] (\text{ClO}_4)_2$		$+1040^\circ (\text{water})$	+	(10)

表4 被取代了的双齿六配位配合物的旋光性

designation	configuration	$[\alpha]_D$	judgement	ref.
$(+)_{589} - [\text{Cr}(\text{en})_2 (\text{CN})_2]^+$		+	+	(16)
$(-)_{589} - [\text{Cr}(\text{en})_2 (\text{CN})_2]^+$		-	-	(16)
		$\text{X} = \text{Cl} + 141^\circ (\text{CH}_2\text{Cl}_2)$	+	(17)
		$\text{X} = \text{I} + 122^\circ (\text{CH}_2\text{Cl}_2)$	+	(17)
		$\text{X} = \text{Cl} + 27^\circ (\text{CH}_2\text{Cl}_2)$	+	(17)
		$\text{X} = \text{I} + 68.7^\circ (\text{CH}_2\text{Cl}_2)$	+	(17)

3.利用八区规律判断配合物分子的旋光符号。在探讨 ORD 和 CD 在有机化学中的应用时,人们总结出了著名的半经验的八区律,并在确定环酮类化合物的构型和优势构象方面得到了满意的结果。1965 年 Hawkins,C.J.等人又提出可用八区法来确定八面体配合物的构型。然而这两种八区法中前者无法应用于配合物,而后者则不能将构型与旋光方向相联系。我们提出的八区法区域符号与他们有所不同,借助该法,可将过渡元素八面体配合物的构型与旋光方向间建立起联系。

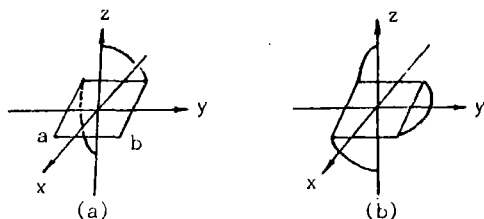


图 4 八区中配合物的位置

Fig.4 Location of a coordination compound in an octant

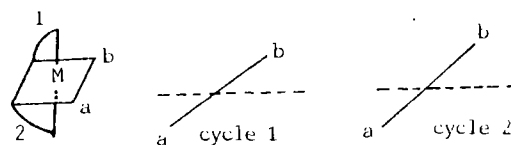


图 5 含两个螯合环的配合物规则

Fig.5 Rule for coordination compounds with two chelate ring

表 5 α 构型的多齿配位配合物旋光性与构型的关系Table 5 The Relationship between the Optical Activity and the Configuration for α -Multi-Dentate

Six Coordinated Compounds				
designation	configuration	$[\alpha]_D^{25}$	$[M]_D^{25}$	judgement ref.
$D-\alpha - [\text{Co}(\text{frien})\text{Cl}_2] \text{Cl}$		$+2770^\circ$	$+8630^\circ$	$+$ (12)
$L^* - \alpha - [\text{Co}(\text{frien})\text{Cl}_2] (\text{ox}) \text{NO}_3$		-798	-2866°	$-$ (12)

(1)空间区域的划分。利用右手直角坐标系把空间分为八个区,每个区的符号由 $-xyz$ 决定,如图所示。

(2)配合物分子的放置。金属离子(或原子)置于坐标原点,在第一级不对称圆球中选择与金属离子相连的,与其他原子连结较少的配位原子,置于 $+x$ 方向(如图 4(a)所示),如六个配位原子连结方式相同,则保持一个环在 xy 平面中,如图所示。

(3)落入八区之三个分界面的原子或原子团不予考虑,仅考虑落入八区的原子或原子团的符号,落入“+”区的为“+”号,落入“-”区的为“-”号。如分子中同时有“+”号基团和“-”号基团存在时,“+”号基团多于“-”号基团呈现右旋光性,反之呈现左旋光性。若“+”、“-”基团数相等,则需要考虑哪一个基团的影响大,影响大者为优势基团。

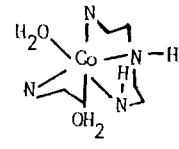
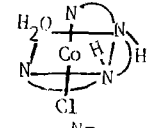
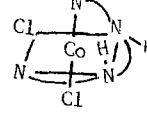
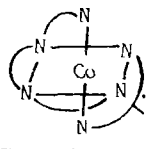
(4)对于只有二个螯合环的六配位化合物,如图所示

可假设 a, b 间亦存在螯合环,若 $a \rightarrow b$ 在光化学序中, a 配位场强度大于 b , 则作为一级圆球不对称的 a, b 原子, 其对旋光性的贡献与同它成左手螺纹的环的贡献一致, 与同它成右手螺纹的环的贡献相反。若 $a \rightarrow b$, a 的场强小于 b , 则情况恰好相反。

4. 氢键溶剂等作用会改变基团对光性贡献的优劣势。因为氢键溶剂与配体中某些原子生成氢键后, 直接影响它们产生配位场强弱。

表 6 β 构型的多齿六配位配合物的旋光性与构型关系

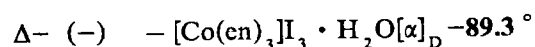
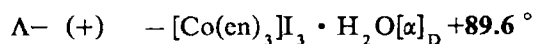
Table 6 The Relationship between the Optical Activity and the Configuration for β -Multi-Dentate Six Coordinated Compounds

designation	configuration	$[\alpha]_D$	$[\mu]_D$	judgement	ref.
$D^+ - \beta - ss - [Co(trien)(H_2O)_2]^{3+}$		+850°	+	+	[13]
$D - \beta - ss - [Co(trien)(H_2O)Cl]^{2+}$		+1600°	+	+	[13]
$D - \beta - ss - [Co(trien)(Cl)_2]^+$		+880°	+	+	[13]
$L^+ - \beta - ss - [Co(l-pn)(trien)]Cl_3$				+	[12]

5. 配合物分子中含有旋光性配体时, 旋光性符号由两个或几个不对称中心的旋光性综合决定。

应用举例

下面,我们就运用我们所提出的规则对我们所常见到的配合物(常为螯合物)进行讨论,为清楚起见,分别按类讨论如下:

一. Λ , Δ 构型双齿六配位配合物

把它们分别按上法置于八区中。

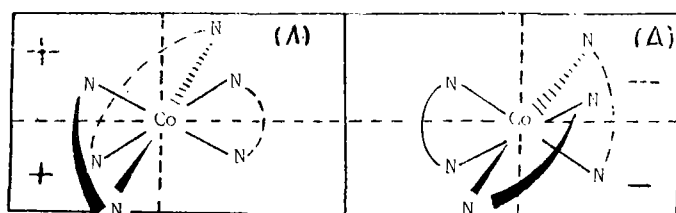
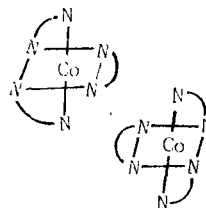


图 6 $\Lambda-(+)_D-[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$ 和 $\Delta-(-)_D$ 的确定

- CH_2CH_2 - 位于前左上“+”

后左上“+”

- CH_2CH_2 - 位于前右上“-”

后右上“-”

Fig. 6 Determination for $\Lambda-(+)_D-[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$ and $\Delta-(-)_D-[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$

二. 构型为 α , β 的多齿配体配合物的旋光性

以上我们讨论了双齿六配位配合物的旋光性与构型的关系,并发现在钠黄线照射下,是基本符合我们的规则的,对于结构更为复杂的多齿配合物,如何应用以上规则来判断呢?首先我们讨论 α 构型的多齿六配位配合物,例如:

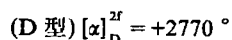
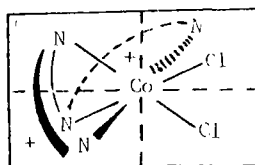
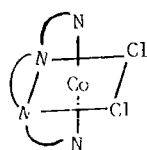
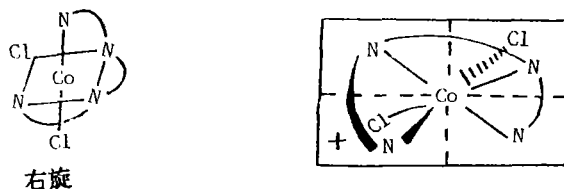


图 7 $\text{D}-\alpha-[\text{Co}(\text{trien})\text{Cl}_2]^+$ 的确定

Fig. 7 Determination for $\text{D}-\alpha-[\text{Co}(\text{trien})\text{Cl}_2]^+$

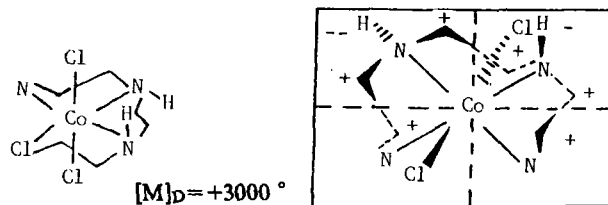
对于 β 构型的多齿配位配合物旋光性与构型的关系与 α 构型一样判断。

图 8 $D-\beta-ss-[Co(trien)Cl_2]^+$ 的确定Fig. 8 Determination for $D-\beta-ss-[Co(trien)Cl_2]^+$

从表中的前三个配合物可看到, 当 $D-\beta-[Co(trien)(H_2O)_2]^{3+}$ 中一个 H_2O 配体为 1^- 取代或二个 Cl^- 取代时, 其配合物的旋光度都变大了, 这是因为 Cl^- 的极化度大于 H_2O 的缘故 $D\beta-[Co(trien)Cl(H_2O)_2]^{2+}$ 旋光度之所以最大, 最重要的原因在于分子的不对称性增高的缘故。

三. trans 构型多齿六配位配合物的旋光性

trans 构型的多齿六配位配合物由于多齿配体近乎在一个平面上, 要考虑到复杂的构象等问题, 所以较难判断, 但只要我们抓住矛盾的主要方面, 则决定事物性质的一方也就易解决。例:

图 9 $trans-ss-[Co(trien)Cl_2]^+$ Fig. 9 Determination for $trans-ss-[Co(trien)Cl_2]^+$

可见在此配合物中, 共六个“+”性基团, 二个“-”性团, 故该化合物为“+”性, 配合物为右旋体, 这与实验结果符合。

我们收集了一百多个钴、钕、等元素的八面体配合物的实验数据, 与判断结果颇为吻合, 由此可见, 应用该规则, 可以将八面体配合物的构型与旋光性之间较好地联系起来。

讨 论

分子的旋光性参数 β 与发生的电偶极跃迁矩和磁偶极跃迁矩间存在着下列关系:

$$\beta = \frac{C}{3\hbar} \sum_a \frac{I_m \langle o|P|a \rangle \cdot \langle a|M|o \rangle}{v_{oa}^2 - v^2}$$

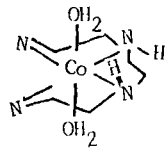
式中 $\langle ol$ 、 $\langle al$ 分别表示分子处于 o 电子态和 a 电子态, P 为电矩算符, M 为磁矩算符, ν_{oa} 为与分子 o 电子态、 a 电子态能量差相对应的频率, h 为普朗克常数, C 为光速。通常把 $I_m \langle 0|P|a \rangle \cdot \langle a|M|0 \rangle$ 的标积称为转动强度, 用 R_{oa} 表示, 而大量分子表现出来的宏观性质—旋光性与转动强度的关系如下^[2]:

$$\Phi = (16\pi^2 NZ / 3hc) \sum_{o \neq a} \frac{\nu^2 (\nu_{oa}^2 - \nu^2) R_{oa}}{(\nu_{oa}^2 - \nu^2)^2 + \Gamma_{oa}^2 \nu^2}$$

式中 Φ 为旋光度数 (以弧度表示), Z 为样品厚度, N 为单位体积中的分子数, Γ_{oa}^2 为衰减系数, 要使 Φ 有一定值的必要条件是 R_{oa} 不为零, 则产生与钠 D 线对应的吸收区的生色团本身或周围环境产生的势函数必须属于或包含生色团所属点群的某个准标量的对称性, 这启发人们从势函数的对称性来寻找旋光性与分子构型间的关系。

表7 TRANS 构型多齿六配位配合物旋光性判定

Table 7 The Optical Activity of Multidentate Six Coordinated Compounds with trans-Configuration

designation	configuration	$[\alpha]_D$ $[\mu]_D$	judgement	ref.
trans-ss-[Co(trien)(H ₂ O) ₂] ³⁺		+750°	+	[13]
trans-ss-[Co(trien)(H ₂ O)Cl] ²⁺		+2930°	+	[13]
trans-ss-[Co(trien)(H ₂ O)Cl ₂] ⁺		+3000°	+	[13]

对于配合物其转动强度可以通过下式计算^[2]:

$$R_{oa} = I_m \langle 0|P|a \rangle \cdot \langle a|M|0 \rangle \quad (3)$$

波函数 $\langle o|$ 可从金属离子和配体函数的简单乘积的基集合 $\langle M_k L_l|$ 得到, M 、 L 代表金属和配体。

我们把微扰作用看成为电荷分布间的静电势, 可用式 (4) 表示:

$$V = \sum_{K(M)} \sum_{L(L)} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (4)$$

与第一级微扰相关的乘积函数为:

$$|M_a L_o\rangle = |M_a L_o\rangle + \sum_{kl} (E_a - E_k - E_l)^{-1} (M_k L_l | V | M_a L_o) |M_k L_l\rangle \quad (5)$$

$d-d$ 跃迁是磁偶极允许而电偶极禁阻的, 跃迁 $o \rightarrow a$ 的磁偶极矩的零极值为:

$$\langle M_a L_o | M | M_o L_o \rangle = (M_a L_o | M | P | M_o L_o) \quad (6)$$

电偶极矩完全借用第一级微扰中的分量

$$\langle M_o L_o | P | M_a L_o \rangle = \sum_{k \neq 0} (-E_k)^{-1} (M_o L_o | V | M_k L_o) (M_k | P | M_a) \quad (7-1)$$

$$+ \sum_{k \neq 0} (E_a - E_k)^{-1} (M_k L_o | V | M_a L_o) (M_o | P | M_k) \quad (7-2)$$

$$+ \sum_{l \neq 0} (-E_a - E_l) (M_o L_o | V | M_a L_l) (L_l | P | L_o) \quad (7-3)$$

$$+ \sum_{l \neq 0} (E_a - E_l)^{-1} (M_o L_l | V | M_a L_o) (L_o | P | L_l) \quad (7-4)$$

式中基态能量作为零。(7-1), (7-2)中右边表示金属的禁阻的电偶极跃迁矩与在配体势场的微扰下允许的电偶极跃迁矩间的混合, 它表示金属原子上的生色团电子和基态配体上的电荷间的静态偶合作用; (7-3), (7-4)是生色团的电偶极跃迁 $M_o \rightarrow M_a$ 和跃迁过程中电荷分布引起的配体的电偶极跃迁 $L_o \rightarrow L_l$ 之间的动态耦合。

要使转动强度不为零, 则 $(M_k L_o / V / M_a L_o)$ 等矩阵元必须为全对称的, 即 V 需要能变换成 $M_k M_a$ 或 $(M_a L_o / P / M_k L_o) \cdot (M_a L_o / M / M_o L_o)$ 的乘积。为此可以把势函数表达成具有生色团对称群变换性质的函数和有许多具有点群对称操作不作用为准标量的势函数, 但其中只有较为简单的可以用作为分区规划。

从微扰势考虑, 对于最简单的 $[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$, 如把 Co^{3+} 作为生色团, 以 $[\text{Co}(\text{N}_6)]$ 作为第一级不对称圆球, 其对称群为 O_h , 从螯合环考虑, 其对称群已降至 D_3 , 如考虑 $T_{2g}^6 - T_{2g}^5 I_g^1$ 的跃迁, 则激发态的对称性将比基态时的 D_3 更低。而微扰势可以展开成具有生色团对称群变换性质的函数和。从定性角度分析, 作为生色团的金属离子, 对应着在跃迁过程中其电荷分布的势函数展开式中, 必然包含着最简单的 xyz 这一项, 因此我们把它作为判断的分区规则。这种分析更适合于 $[M(\text{ee})_2 aa]$, $[M(\text{ee})_2 ab]$ 等含有两个螯合环的配合物分子。

基于上述分析可以自然的与八区规律联系起来, 各区的符号由该区坐标 x_i, y_i, z_i 乘积的负值(即 $-x_i, y_i, z_i$)确定。这说明了我们的规则 3。

直接与金属离子(或原子)相结合的原子作为微扰配体,它们的影响最大,所以不对称圆球模型中第一级圆球的配位场的不对称性引起的旋光性最大。如六个配位原子等同,则应考虑第二级不对称圆球的影响,这说明了我们的规则1。外界离子的存在对旋光性的影响,只影响大小,不改变符号(规则2),也可以从它们至少处于第三或第四级不对称圆球之外找到答案。

作为在确定波长(钠的D线和汞的绿线)下测定的配合物的旋光性,有时可能正好处于几个吸收带的重叠区,致使出现个别例外。

致谢:南京大学游效曾教授,曾对本工作提出宝贵意见,特此致谢。韩世清,张文英两同志参加了本工作。

参 考 文 献

- [1]Huheey,J.E.,*Inorg.Chem.(principle of structure and reactivity)*,452-457,Harper and Row(1980).
- [2]Saito,Y.*Inorganic Molecular Dissymmetry*,132-136,Berlin,Heidelberg,New York (1985).
- [3]Schellmann,J.A.,*Journal of Chemical physics*,44,55-63 (1966).
- [4]周志华,汤杰等,化学通报,1,11-17(1987).
- [5]周志华,汤杰,化学通报,2,22-27(1987).
- [6]Tatehata,A.,Iiyoshi,M. and Kotsuji,K.,*J.,Am.Chem.Soc.*,103,7391 (1981).
- [7]Bosnich,B. and Macb,J.Harrowfield,*J.Am.Chem.Soc.*,94,3436 (1972).
- [8]Dwyer,P.,Garvan,L. and Shulmen,A.,*J.Am.Chem.Soc.*,81,292 (1959).
- [9]Anthony,A.Smith and Rolannd,A.Haines,*J.Am.Chem.Soc.*,91,292(1969).
- [10]Bosnich,B.,*Inorg.Chem.*,7,2383 (1968).
- [11]Buckingham,D.A.,Dekkers,J.,Sargeson,A.M.,*Inorg.Chem.*,12,2020 (1973).
- [12]Kyunno,E. and John,C.Bailar,Jr.,*J.Am.Chem.Soc.*,88,5448(1966).
- [13]Buckingham,D.A.,Marzilli,P.A. and Sangeson,A.M.,*Inorg.Chem.*,6,1034-1036 (1967).
- [14]叶秀林,立体化学,高等教育出版社,北京,307 页(1982).
- [15]Hankins,C.J.,*Acta Chem.Scand.*,19,185(1965).
- [16]ttelberger.A.P.,Darson,D.D.etal,*Inorg.Chem.*,15,1415(1976).
- [17]Shen,C.,Grocott etal,*Inorg Chem*,21,3532(1982).
- [18]Chney,E.,*The Molecular Basis of Optical Activity*,47-51,New york(1979).

OPTICAL ACTIVITY AND CONFIGURATION OF MOLECULES OF COORDINATION COMPOUNDS WITH OCTAHEDRAL SHAPE

Zhou Zhihua, Tang jie, Hu Xiuzhen

(Department of Chemistry, Nanjing Normal University)

We suggest some regulations and octant rule in coordination compound based on the unsymmetrical model of the multiple spheres of polarizability and symmetry rules. The model is suitable for organic compound containing one or two unsymmetrical carbons. By use of these regulations and rules, the molecular configuration of coordination compounds with octahedral shape can be conveniently correlated with their rotatory direction.

Keywords: optical activity molecular configuration octant rule