

10种2-[(N-取代芳胺基)羰基] 苯甲酸与Cr(III)的配合物研究

石进超 王振军 马怀让

(西北大学化学系, 西安 710069)

关键词: 配体 八面体 结构

[(N-取代芳胺基)羰基]苯甲酸与过渡金属的配合物均有不同程度的生物活性^[1]。我们合成的许多金属配合物, 经有关生物研究所几年来的植物生长实验, 其中一些增产效果在10~15%, 因而对这一类配合物的结构及调节植物生长机理的研究, 将具有重要的理论意义和经济价值。本文所报道的10种配合物, 前9种配体酸为2-[(N-取代苯胺基)羰基]苯甲酸, 后一种为2-[(2-萘胺基)羰基]苯甲酸。

实 验 部 分

10种配体酸按文献^[2]报道的方法合成。金属配合物均用新鲜制备的氢氧化铬与配体酸反应制得。配合物元素分析如表1所示。

表1 配合物的分析数据

Table 1 Analytical Data of Complexes

No	complex	analysis found (calcd.)			μ_{eff} (B.M.)	δ^-
		C	H	M		
1	Cr(2-Cl-PCBA) ₃	57.02(57.58)	2.96(3.11)	6.12(5.94)	3.68	1.90
2	Cr(3-Cl-PCBA) ₃	57.21(57.58)	2.85(3.11)	(6.09)(5.94)	3.67	1.89
3	Cr(2-Br-PCBA) ₃	50.12(49.78)	2.87(2.70)	5.84(5.15)	3.66	1.85
4	Cr(3-Br-PCBA) ₃	50.45(49.78)	2.95(2.70)	5.75(5.15)	3.66	1.85
5	Cr(2-Me-PCBA) ₃	66.50(66.30)	4.05(4.45)	6.75(6.38)	3.60	1.86
6	Cr(2,4-DMe-PCBA) ₃	66.81(67.28)	4.10(4.90)	6.27(6.07)	3.65	1.88
7	Cr(2-OCH ₃ -PCBA) ₃	63.02(62.64)	4.20(4.21)	6.30(6.03)	3.61	1.86
8	Cr(4-OC ₂ H ₅ -PCBA) ₃	63.05(63.71)	4.37(4.68)	6.03(5.75)	3.70	1.90
9	Cr(2-NO ₂ -PCBA) ₃	54.62(55.57)	3.02(2.67)	5.66(5.73)	3.64	1.88
10	Cr(NCBA) ₃	68.80(69.75)	4.19(3.93)	5.78(5.63)	3.75	1.94

结 果 与 讨 论

一. 红外光谱 与配体酸的相应峰比较, 配合物的N-H伸展振动吸收峰变化很小, 而它们的酰胺I峰却向低频移动了很多(见表2), 说明酰胺基羰基氧原子参与了配位。

表 2 取代苯甲酸及其配合物的酰胺羰基吸收峰位置(cm^{-1})Table 2 Stretching Frequencies in Amido C=O of Acids and Their Complexes(cm^{-1})

No	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
complex	1675	1665	1670	1667	1650	1665	1665	1655	1630	1650
acid	1710	1720	1710	1715	1704	1698	1698	1710	1680	1710

二.紫外-可见光谱 3 个吸收带可归属为 $4T_{2g} \leftarrow 4A_{2g}(\nu_1)$, $4T_{1g}(F) \leftarrow 4A_{2g}(\nu_2)$, $4T_{1g}(P) \leftarrow 4A_{2g}(\nu_3)$ 自旋允许的 $d-d$ 跃迁. 指定 ν_1 为 $10Dq$, ν_2, ν_3 的理论跃迁值可计算出来. 应用 B 值可计算得每个配体的自旋轨道偶合常数⁽³⁾. $\nu_1, \nu_2, B, \beta, \text{LFSE}, \lambda$ 及 ν 如表 3 所示.

表 3 配合物的光谱数据

Table 3 Spectral Data of Complexes

No.	complex	spectral data (cm^{-1})			electronic parameters				LFSE ($\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)
		found (calcd.)			B	β	λ	ν	
1	$\text{Cr}(2\text{-Cl-PCBA})_3$	17180	23380	37530	625	0.68	60.7	0.67	246.6
		10Dq	23570	37346					
2	$\text{Cr}(3\text{-Cl-PCBA})_3$	17170	23100	37600	612	0.67	59.5	0.66	246.6
		10Dq	23364	37236					
3	$\text{Cr}(2\text{-Br-PCBA})_3$	17160	23400	37520	630	0.69	61.2	0.68	246.3
		10Dq	22588	37342					
4	$\text{Cr}(3\text{-Br-PCBA})_3$	17140	23370	37500	630	0.69	61.2	0.68	246.0
		10Dq	23565	37304					
5	$\text{Cr}(2\text{-Me-PCBA})_3$	17050	23600	37800	683	0.74	66.3	0.74	244.7
		10Dq	23588	37340					
6	$\text{Cr}(2,4\text{-DMe-PCBA})_3$	17080	23590	37780	675	0.73	65.7	0.73	245.2
		10Dq	23851	37515					
7	$\text{Cr}(2\text{-OCH}_3\text{-PCBA})_3$	17040	23700	37750	685	0.75	66.7	0.74	244.6
		10Dq	23882	37514					
8	$\text{Cr}(4\text{-OC}_2\text{H}_5\text{-PCBA})_3$	16970	23350	37990	696	0.76	67.8	0.75	243.6
		10Dq	23886	37464					
9	$\text{Cr}(2\text{-NO}_2\text{-PCBA})_3$	17280	23200	37600	597	0.74	58.1	0.65	248.6
		10Dq	23484	37312					
10	$\text{Cr}(\text{NCBA})_3$	17900	23300	37580	579	0.62	56.4	0.62	250.0
		10Dq	23632	37538					

三.磁矩 μ_{eff} g- 值与八面体场的相应值很接近⁽⁴⁾, 其值如表 1 所示.

参 考 文 献

- [1] U.S. 4,108,632(CA 90:98562).
[2] Malcolin, D.H., *J. Chem. Soc., Perkin II* 642(1976).
[3] Charma, C.L., Jain, P.K., Tik, D., *J. Inorg. Nuclear Chem.*, **42**, 1681(1980).
[4] Cole G.M., Garrett B.B., *Inorg. Chem.*, **9**, 1898(1970).
[5] Rastogi, D.K., Jain, P.C., *Indian J. Chem.*, **10**, 100(1970).

STUDIES ON COMPLEXES OF Cr(Ⅲ) WITH THE
SUBSTITUTED PHTHALANILIC ACIDS

Shi Jinchao Wang Zhenjun Ma Huairang

(Department of Chemistry, Northwestern University, Xian 710069)

Complexes of Cr(Ⅲ) with ten of substituted phthalanilic acids have been prepared and characterized by the basis of elemental analysis, infrared and electronic spectra and magnetic susceptibility. The ligand field parameters, e.g. $10Dq$, LFSE, B , β , λ , g - have been evaluated from the spectral and magnetic data for all the complexes. The results show that coordination occurs though two oxygen atoms in amido and hydroxy of carboxylates and the complexes have octahedral structure.

Keywords: ligand octahedral structure