

研究简报

配合物 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$ 的合成和晶体结构卢文贯^{*,1} 冯小龙² 刘宏文¹ 王少玲¹⁽¹⁾ 韶关学院化学系, 韶关 512005⁽²⁾ 中山大学分析测试中心, 广州 510275

关键词: Schiff 碱 酰肼 铜(II)配合物 晶体结构
 分类号: O614.121

酰肼类配体是众多 Schiff 碱中的一种, 它是以氮和氧原子为配位原子, 与生物环境较接近, 形成配合物后的生物活性比配位前明显增加, 其配合物有着广泛的生物和药物活性^[1-6]。王积涛等^[7]利用水杨醛缩苯甲酰肼及其衍生物与二苯基二氯化锡(IV)合成了一系列具有抗癌活性的五配位金属有机锡(IV)化合物, 高山等^[8-10]则利用水杨醛缩苯甲酰肼及其衍生物合成了五配位的钒氧酰肼配合物。铜是人体必需的微量元素, 它作为配合物的活性中心离子存在于具有生物功能的蛋白质分子中, 其配合物对生命体系有特殊的生物活性和催化作用, 而且具有丰富多彩的立体结构^[11]。同时, 在不少生物配体中都含有芳环及氮、氧配位原子, 且与铜(II)离子配位的原子大多也是氮、氧原子。因此, 研究含酰肼配体的铜(II)配合物的合成、结构与性质的关系十分重要。

本文报道铜(II)与水杨醛缩苯甲酰肼的配合物 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$ 的合成及结构表征。

1 实验部分

1.1 试剂和仪器

水杨醛、苯甲酰肼、吡啶、醋酸铜及其他有机溶剂均为市售分析纯试剂, 直接使用。

元素分析用 Vario EL CHNS-O 元素分析仪测定, 红外光谱用 Nicolet-360 FT-IR 光谱仪记录 ($4000 \sim 400\text{cm}^{-1}$, KBr 压片法), 热重分析用 Netzsch TG-209 热重分析仪测定, 样品重量 3.52mg, 空气

氛, 升温速度 $10^\circ\text{C} \cdot \text{min}^{-1}$ 。Bruker SMART 1000 CCD 单晶衍射仪。

1.2 配体 H_2L : $\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_2$ (水杨醛缩苯甲酰肼) 的合成

将 2.72g (20.0mmol) 水杨醛溶于无水乙醇中, 慢慢加入含 2.44g (20.0mmol) 苯甲酰肼的无水乙醇溶液, 于室温下搅拌 2h, 有白色沉淀生成, 过滤, 即得粗产品, 用冷的无水乙醇洗涤数次, 真空干燥, 产率 83%, 化学式为 $\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_2$, 元素分析结果 (括号内为计算值)/%: C 69.84 (70.00), H 5.26 (5.00), N 11.91 (11.67)。

1.3 标题配合物的合成及单晶培养

将 0.48g (2mmol) 配体 $\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_2$ 在微热下溶于 30mL 无水乙醇中, 搅拌下慢慢加入含 0.40g (2mmol) 醋酸铜的水溶液, 于 60°C 下搅拌回流 8h, 冷却, 过滤, 将所得草绿色固体依次用水和无水乙醇洗涤, 并放置于硅胶干燥器中干燥保存。然后, 将少量固体溶解在无水乙醇和吡啶的混合溶剂中 (V: V, 1/1), 两个星期后得到柱状黑紫色标题配合物单晶。配合物的化学式为 $\text{C}_{19}\text{H}_{15}\text{N}_3\text{O}_2\text{Cu}$, 元素分析结果 (括号内为计算值)/%: C 59.76 (59.84), H 4.02 (3.94), N 10.86 (11.02)。

1.4 晶体结构的测定

选取大小为 $0.48 \times 0.36 \times 0.35\text{mm}^3$ 的单晶, 室温下 [$(20 \pm 2)^\circ\text{C}$] 在带有石墨单色器的 Bruker SMART 1000 CCD 单晶衍射仪上进行衍射实验。用

收稿日期: 2002-08-22。收修改稿日期: 2002-11-19。

* 通讯联系人。E-mail: lwg@sgu.edu.cn

第一作者: 卢文贯, 男, 37 岁, 副教授; 研究方向: 配位化学和金属有机化学。

$\text{Mo K}\alpha$ 射线 (0.071073nm), 以 $\omega/2\theta$ 扫描方式在 $1.29^\circ < \theta < 27.12^\circ$ 范围内收集到 19186 个衍射强度数据, 其中 7154 个为独立衍射点 ($R_{\text{int}} = 0.0218$), 被用来进行结构分析和修正。晶体结构由直接法解出 [SHELXS-97 (Sheldrick, 1997)], 用全矩阵最小二乘法修正结构 [SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)], 氢原子坐标由理论计算加入。表 1 给出标题配合物的晶体学数据。

CCDC: 193111。

表 1 标题配合物的晶体学数据

Table 1 Crystal Structure Parameters of the title Complex

crystal system	monoclinic
space group	$P2_1/c$
a/nm	1.6362(9)
b/nm	1.7140(9)
c/nm	1.2255(7)
$\beta/^\circ$	105.168(9)
volume/ nm^3	3.317(3)
Z	8
density(calculated)/($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	1.525
absorption coefficient	1.334
$\mu(\text{Mo K}\alpha)/\text{mm}^{-1}$	
$F(000)$	1560
crystal size/ mm^3	$0.48 \times 0.36 \times 0.35$
θ range for data collection	1.29° to 27.12°
limiting indices	$-20 \leq h \leq 20, -21 \leq k \leq 16,$ $-15 \leq l \leq 10$
reflections collected/unique	19186/7154 [$R(\text{int}) = 0.0218$]
data/restraints/parameters	7154/0/451
goodness-of-fit on F^2	1.033
final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0376, wR_2 = 0.0909$
R indices (all data)	$R_1 = 0.0659, wR_2 = 0.1056$
largest diff. peak	390 and -341
and hole/($\text{e} \cdot \text{nm}^{-3}$)	

2 结果与讨论

2.1 红外光谱

水杨醛缩苯甲酰脲三齿 Schiff 碱配体在 3433cm^{-1} 处出现水杨醛羟基中等强度而宽的 ν_{OH} 吸收峰, 在 3273cm^{-1} 处出现胍基 ($-\text{NH}-\text{N}=\text{C}-$) 中强而尖锐的 ν_{NH} 吸收峰, 在 1675cm^{-1} 处出现强而尖锐的吸收峰则归属为配体中 $-\text{CONH}-$ 的 $\nu_{\text{C}=\text{O}}$ 吸收峰。在标题配合物 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$ 中, 这些吸收峰均消失, 在 1594cm^{-1} 处出现新的强而尖锐的 $\nu_{\text{C}=\text{N}-\text{N}=\text{C}}$ 吸收峰^[7], 又在 1309cm^{-1} 处出现新的中等强度烯醇 $\nu_{\text{C}=\text{O}}$ 吸收峰。表明配体中水杨醛羟基氢直接被铜(II)取代, 而胍基氢 ($-\text{NH}-\text{N}=\text{C}-$) 则是经过烯醇化后被铜(II)取代^[8-10]。可见, 水杨醛缩苯甲酰脲三齿 Schiff

碱配体是失去两个质子后以负二价离子与铜(II)配位的。配体中 1631cm^{-1} 处的 $\nu_{\text{C}=\text{N}}$ 吸收峰在生成配合物后向低波数方向移动了 18cm^{-1} , 出现在 1613cm^{-1} 处, 表明配体中亚氨基上的氮原子也参与了与铜(II)的配位^[8-10]。配合物中 $\nu_{\text{Cu}-\text{N}}$ 和 $\nu_{\text{Cu}-\text{O}}$ 吸收峰分别出现在 553cm^{-1} 和 470cm^{-1} 附近^[12]。红外光谱分析与配合物的晶体结构分析结果一致。

2.2 晶体结构

配合物 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$ 的分子结构和在晶胞中的堆积示于图 1 和图 2, 非氢原子的坐标及热参数列于表 2, 部分键长及主要键角列于表 3。在每个不对称单元中, 存在两个 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$ 配合物分子, 它们的 N_2O_2 配位平面的二面角为 10.3° 。除了水杨醛缩苯甲酰脲三齿 Schiff 碱配体与铜(II)所形成的相应键长和键角有些差异外, 这两个分子的几何构型基本相同。本文着重讨论 Cu1 配合物的分子结构。

在配合物 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$ 的分子结构中, 中心离子铜(II)具有四配位的几何结构, 其中水杨

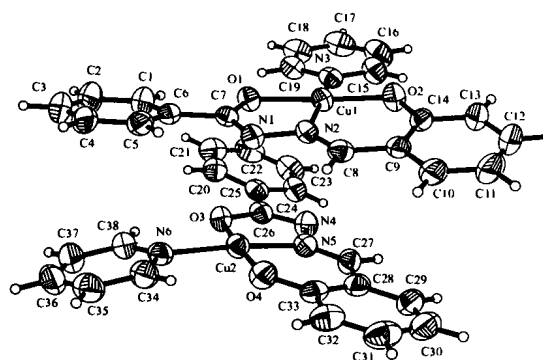


图 1 标题配合物的分子结构图

Fig. 1 Molecular structure of the title complex

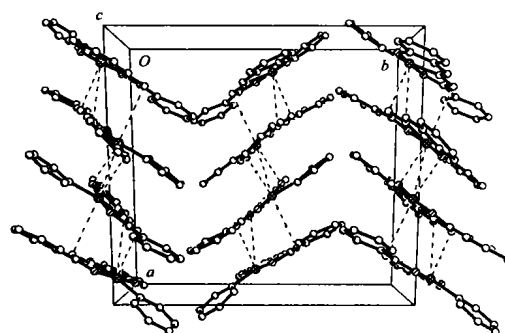


图 2 标题配合物分子在晶胞中的堆积图

Fig. 2 Packing diagram of the title complex molecules in a unit cell

表 2 非氢原子坐标及热参数

Table 2 Nonhydrogen Atomic Coordinates ($\times 10^4$) and Equivalent Isotopic Displacement Parameters ($\text{nm}^2 \times 10^5$)

atom	x	y	z	Ueq [*]	atom	x	y	z	Ueq [*]
Cu(1)	4017(1)	4726(1)	4143(1)	46(1)	C(24)	2603(2)	2859(2)	2192(3)	61(1)
Cu(2)	1147(1)	5300(1)	3275(1)	49(1)	C(25)	2275(2)	3588(2)	1818(2)	50(1)
C(1)	2783(2)	6068(2)	750(3)	61(1)	C(26)	1887(2)	4087(2)	2541(3)	50(1)
C(2)	2466(3)	6534(2)	-189(3)	80(1)	C(27)	1643(2)	4263(2)	5196(3)	54(1)
C(3)	2080(2)	7227(2)	-81(3)	79(1)	C(28)	1316(2)	4768(2)	5900(3)	54(1)
C(4)	2008(2)	7453(2)	958(3)	69(1)	C(29)	1387(2)	4532(2)	7014(3)	66(1)
C(5)	2318(2)	6992(2)	1888(3)	55(1)	C(30)	1116(2)	4985(3)	7762(3)	78(1)
C(6)	2708(2)	6287(2)	1794(2)	44(1)	C(31)	728(2)	5684(3)	7390(3)	78(1)
C(7)	3056(2)	5789(2)	2792(2)	41(1)	C(32)	638(2)	5933(2)	6305(3)	69(1)
C(8)	3161(2)	5556(2)	5572(2)	49(1)	C(33)	936(2)	5494(2)	5522(3)	52(1)
C(9)	3587(2)	5115(2)	6548(2)	50(1)	C(34)	136(2)	6704(2)	2529(3)	65(1)
C(10)	3368(2)	5266(2)	7558(3)	67(1)	C(35)	-392(2)	7208(2)	1777(4)	78(1)
C(11)	3766(3)	4900(3)	8548(3)	82(1)	C(36)	-521(2)	7090(2)	647(4)	82(1)
C(12)	4404(3)	4374(3)	8542(3)	82(1)	C(37)	-113(2)	6494(2)	284(3)	79(1)
C(13)	4634(2)	4208(2)	7572(3)	65(1)	C(38)	414(2)	6019(2)	1070(3)	64(1)
C(14)	4233(2)	4570(2)	6550(2)	51(1)	N(1)	2853(1)	5967(1)	3731(2)	47(1)
C(15)	5076(2)	3340(2)	4157(3)	65(1)	N(2)	3292(1)	5472(1)	4592(2)	45(1)
C(16)	5537(2)	2796(2)	3726(4)	81(1)	N(3)	4602(1)	3880(1)	3495(2)	49(1)
C(17)	5505(2)	2808(2)	2611(4)	78(1)	N(4)	1990(2)	3861(1)	3590(2)	57(1)
C(18)	5015(2)	3346(2)	1938(3)	68(1)	N(5)	1618(2)	4404(1)	4154(2)	49(1)
C(19)	4574(2)	3875(2)	2399(3)	56(1)	N(6)	529(2)	6114(1)	2179(2)	55(1)
C(20)	2329(2)	3849(2)	775(3)	59(1)	O(1)	3546(1)	5219(1)	2695(2)	49(1)
C(21)	2702(2)	3391(2)	116(3)	71(1)	O(2)	4498(1)	4392(1)	5648(2)	60(1)
C(22)	3027(2)	2673(2)	493(3)	74(1)	O(3)	1488(1)	4711(1)	2109(2)	54(1)
C(23)	2981(2)	2408(2)	1532(3)	73(1)	O(4)	862(1)	5788(1)	4515(2)	60(1)

* Ueq is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

醛缩苯甲酰脲三齿 Schiff 碱配体的负二价离子提供两个配位氧原子和一个配位氮原子, 吡啶提供一个配位氮原子。配体与铜(II)所形成的 Cu1-O1、Cu1-O2 和 Cu1-N2 键长值分别为 0.1935(2) nm、0.1894(2) nm 和 0.1920(2) nm, 吡啶氮原子与 Cu1 原子之间的 Cu1-N3 键长值为 0.2013(2) nm。相应的四个键角 O1-Cu1-N2、O2-Cu1-N2、O2-Cu1-N3 和 O1-Cu1-N3 分别为 81.04(9)°、93.08(10)°、92.66(10)°和 93.95(10)°。O1、O2、N2 和 N3 四个配位原子基本上共平面, Cu1 原子偏离该平面 0.00211 nm。因此, 由相应的键长和键角数据可知, Cu1 原子具有扭曲的平面正方形配位结构, 与同为四配位的铜(II)配合物 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_9\text{NO}_3)(\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_2)^{[12]}$ 的结构极其相似, 已报道的这类配合物多数具有五配位的四角锥结构^[13,14]。由水杨醛缩苯甲酰脲三齿 Schiff 碱配体提供的 O1、C7、N1 和 N2 等配位原子和 Cu1 所形成的五元环处在一个平面上, 其最小二乘平面的平均偏差为 0.00163 nm, 由 O2、C14、C9、C8 和 N2 等配位原子和 Cu1 所形成的六元环平面共面性也较好, 其最小二

乘平面的平均偏差为 0.00413 nm, 二平面的二面角为 5.1°。

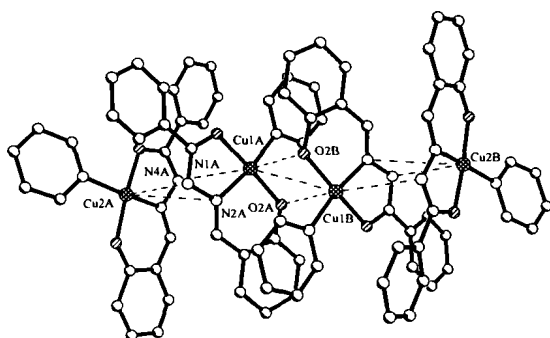
与文献^[13,14]所报道的铜(II)配合物相比, 由于在水杨醛缩苯甲酰脲三齿 Schiff 碱配体中存在强吸电子基团并形成了 $-\text{C} \equiv \text{N}-\text{N}=\text{C}-$ 共轭双键与苯环的大共轭体系, 降低了配位原子的给电子能力, 使中心离子铜(II)所处的配位场为弱场, 而文献^[13,14]的配体则形成强场, 所以标题配合物中铜(II)为四配位的平面四边形几何结构, 而文献^[13,14]所报道的配合物为五配位的四方锥几何结构。

在相邻的两个配合物分子间存在着不同程度的弱相互作用(图 2、图 3), Cu1A $\cdots$ Cu1B(0.3479 nm)、Cu1A $\cdots$ O2B(0.2814 nm)、Cu1B $\cdots$ O2A(0.2814 nm)、Cu1A $\cdots$ N4A(0.3532 nm)、Cu1A $\cdots$ Cu2A(0.4641 nm)、Cu2A $\cdots$ N1A(0.2937 nm)、Cu2A $\cdots$ N2A(0.3472 nm)(A 对称变换为 x, y, z ; B 对称变换为 $-x, -y, -z$)。Cu1A $\cdots$ O2B 和 Cu1B $\cdots$ O2A 的这种分子间弱相互作用, 使得 Cu1A 与 Cu1B 两个配合物分子以较弱的二聚体结构形式结合在一起。

表3 部分键长及主要键角

Table 3 Selected Bond Distances(nm) and Bond Angles($^\circ$) of the Title Complex

Cu(1)-O(2)	0.1894(2)	Cu(1)-N(2)	0.1920(2)	Cu(1)-O(1)	0.1935(2)
Cu(1)-N(3)	0.2013(2)	Cu(2)-O(4)	0.1896(2)	Cu(2)-N(5)	0.1919(2)
Cu(2)-O(3)	0.1947(2)	Cu(2)-N(6)	0.2015(3)	C(6)-C(7)	0.1478(4)
C(7)-O(1)	0.1289(3)	C(7)-N(1)	0.1313(3)	C(8)-N(2)	0.1282(4)
C(8)-C(9)	0.1433(4)	C(14)-O(2)	0.1326(4)	C(15)-N(3)	0.1336(4)
C(19)-N(3)	0.1332(4)	C(25)-C(26)	0.1488(4)	C(26)-O(3)	0.1292(3)
C(26)-N(4)	0.1311(4)	C(27)-N(5)	0.1289(4)	C(27)-C(28)	0.1423(5)
C(33)-O(4)	0.1309(4)	C(34)-N(6)	0.1328(4)	C(38)-N(6)	0.1332(4)
N(1)-N(2)	0.1397(3)	N(4)-N(5)	0.1392(3)		
O(2)-Cu(1)-N(2)	93.08(10)	O(2)-Cu(1)-O(1)	171.72(9)	N(2)-Cu(1)-O(1)	81.04(9)
O(2)-Cu(1)-N(3)	92.66(10)	N(2)-Cu(1)-N(3)	170.58(9)	O(1)-Cu(1)-N(3)	93.95(10)
O(4)-Cu(2)-N(5)	92.84(10)	O(4)-Cu(2)-O(3)	174.03(9)	N(5)-Cu(2)-O(3)	81.19(10)
O(4)-Cu(2)-N(6)	92.49(11)	N(5)-Cu(2)-N(6)	170.53(10)	O(3)-Cu(2)-N(6)	93.44(11)
C(1)-C(6)-C(7)	120.4(3)	C(5)-C(6)-C(7)	121.4(3)	O(1)-C(7)-N(1)	124.2(2)
O(1)-C(7)-C(6)	118.3(2)	N(1)-C(7)-C(6)	117.4(2)	N(2)-C(8)-C(9)	124.0(3)
C(10)-C(9)-C(8)	117.4(3)	C(14)-C(9)-C(8)	123.5(3)	O(2)-C(14)-C(13)	117.7(3)
O(2)-C(14)-C(9)	124.1(3)	N(3)-C(15)-C(16)	121.3(3)	N(3)-C(19)-C(18)	122.5(3)
C(20)-C(25)-C(26)	120.5(3)	C(24)-C(25)-C(26)	120.5(3)	O(3)-C(26)-N(4)	124.6(3)
O(3)-C(26)-C(25)	118.7(3)	N(4)-C(26)-C(25)	116.7(3)	N(5)-C(27)-C(28)	124.5(3)
C(29)-C(28)-C(27)	117.9(3)	C(33)-C(28)-C(27)	122.7(3)	O(4)-C(33)-C(32)	118.4(3)
O(4)-C(33)-C(28)	124.8(3)	N(6)-C(34)-C(35)	122.0(4)	N(6)-C(38)-C(37)	122.5(4)
C(7)-N(1)-N(2)	108.9(2)	C(8)-N(2)-N(1)	117.5(2)	C(8)-N(2)-Cu(1)	127.6(2)
N(1)-N(2)-Cu(1)	114.94(17)	C(19)-N(3)-C(15)	118.1(3)	C(19)-N(3)-Cu(1)	120.5(2)
C(15)-N(3)-Cu(1)	121.3(2)	C(26)-N(4)-N(5)	109.2(2)	C(27)-N(5)-N(4)	117.5(3)
C(27)-N(5)-Cu(2)	127.6(2)	N(4)-N(5)-Cu(2)	114.86(19)	C(34)-N(6)-C(38)	118.1(3)
C(34)-N(6)-Cu(2)	120.8(2)	C(38)-N(6)-Cu(2)	120.5(2)	C(7)-O(1)-Cu(1)	110.71(17)
C(14)-O(2)-Cu(1)	126.78(19)	C(26)-O(3)-Cu(2)	109.86(19)	C(33)-O(4)-Cu(2)	127.2(2)

图3 Cu1A与Cu1B配合物分子间以 $\text{Cu}\cdots\text{O}$ 弱相互作用形成的二聚体Fig. 3 Dimer of complexes Cu1A and Cu1B through $\text{Cu}\cdots\text{O}$ interactions

2.3 热分析

分析标题配合物 $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$ 的 TG-DTG 分析曲线, 可见配合物的热分解过程分为三个阶段, 其起始分解温度为 82.0°C , 终止分解温度为 472.0°C 。由失重百分率推测, 配合物第一阶段

($82.0 \sim 237.6^\circ\text{C}$) 失去的是苯甲酰肼中的苯基 (C_6H_5) 部分, 失重率 20.43%, 理论值 20.21%。第二阶段 ($237.6 \sim 363.8^\circ\text{C}$) 失去的是吡啶和苯甲酰肼中的剩余部分 ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N} + \text{CON}_2$), 失重率 36.07%, 理论值 35.43%。第三阶段 ($363.8 \sim 472.0^\circ\text{C}$) 失去最后部分 (C_7H_5), 变成 CuO , 失重率 23.69%, 理论值 23.36%。残余 CuO 含量, 实测值 21.15%, 理论值 21.00%。从以上数据可以看出, 配合物失重率的实测值与理论计算值基本符合, 进一步论证了我们的结构是正确的。

参 考 文 献

- [1] Ainscough E. W., Brodie A. M., Dobbs A. J. et al *Inorg. Chim. Acta*, **1998**, *267*, 27.
- [2] Liu S. X., Gao S. *Polyhedron*, **1998**, *17*(1), 81.
- [3] Ranford J. D., Vittal J. J., Wang Y. M. *Inorg. Chem.*, **1998**, *37*, 1226.
- [4] Nawar N., Hosny N. M. *Trans. Met. Chem.*, **2000**, *25*, 1.

- [5] XIAO Wen(肖文), ZHANG Hua-Xin(张华新), LU Zhong-Lin(卢忠林) et al *Zhongshan Daxue Xuebao, Ziran Kexue Ban (Acta Scientiarum Naturalium University Sunyatseni)*, **2001**, **40**(1), 39.
- [6] Thompson L. K., Matthews C. J., Zhao L. et al *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, **2001**, 2258.
- [7] Wang J. T., Liu F. Q., Zhang Y. W. et al *J. Organomet. Chem.*, **1989**, **375**, 173.
- [8] Gao S., Weng Z. Q., Liu S. X. *Polyhedron*, **1998**, **17**(20), 3595.
- [9] GAO Shan(高山), LIU Shi-Xiong(刘世雄) *Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao (Chem. J. Chin. Univ.)*, **2000**, **21**(5), 671.
- [10] GAO Shan(高山), LIU Shi-Xiong(刘世雄) *Yingyong Huaxue (Chinese J. Appl. Chem.)*, **2001**, **18**(2), 161.
- [11] Khan M. F., Ahmad P. M. et al *Wuji Huaxue Xuebao (Chinese J. Inorg. Chem.)*, **1998**, **14**(1), 29.
- [12] GAO Shan(高山), SHI Zhan(施展), HUA Jia(华佳) et al *Gaodeng Xuexiao Huaxue Xuebao (Chem. J. Chin. Univ.)*, **2000**, **21**(2), 177.
- [13] ZHANG Wen-Xing(张文兴), LI Jian(李健), SI Shu-Feng(司书峰) et al *Wuji Huaxue Xuebao (Chinese J. Inorg. Chem.)*, **1999**, **15**(5), 573.
- [14] NIU De-Zhong(牛德仲), MU Lai-Long(沐来龙), LU Zai-Sheng(路再生) et al *Jiegou Huaxue (Chinese J. Struct. Chem.)*, **2002**, **21**(1), 55.

Synthesis and Crystal Structure of Complex $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$

LU Wen-Guan^{*1} FENG Xiao-Long² LIU Hong-Wen¹ WANG Shao-Ling¹

⁽¹⁾ Department of Chemistry, Shaoguan University, Shaoguan 512005

⁽²⁾ Center of Analysis and Measurement, Zhongshan University, Guangzhou 510275

The novel copper (II) complex with salicylaldehyde benzoylhydrazone and pyridine ligands, $\text{Cu}(\text{C}_{14}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_2)(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})$, has been synthesized and characterized by elemental analysis, IR and thermal analysis. The crystal structure of the title complex has been determined by single crystal X-ray diffraction techniques. The crystal belongs to monoclinic with space group $P2_1/c$. The cell parameters are: $a = 1.6362(9)$ nm, $b = 1.7140(9)$ nm, $c = 1.2255(7)$ nm, $\beta = 105.168(9)^\circ$, $V = 3.317(3)$ nm³, $Z = 8$, $D_c = 1.525\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$, $\mu(\text{Mo K}\alpha) = 1.334\text{mm}^{-1}$, $F(000) = 1560$. The structure was refined to final $R_1 = 0.0376$, $wR_2 = 0.0909$. The copper (II) ion lies in a distorted square-planar environment composed of two oxygen atoms, one nitrogen atom of tridentate acyhydrazone Schiff base ligand and one nitrogen atom of the pyridine ligand. CCDC: 193111.

Keywords: schiff base acyhydrazone copper (II) complex crystal structure