基于 2-氨基对苯二甲酸的镉配位聚合物的合成、晶体结构和性质研究

胡云霞^{1,2} 章文伟^{1*} 李一志¹ 白俊峰^{1*}

Synthesis, Crystal Structures and Properties of Cadmium Coordination Polymers Based on

2-Aminoterephthalic Acid

HU Yun-Xia^{1,2} ZHANG Wen-Wei^{*,1} Li Yi-Zhi¹ BAI Jun-Feng^{*,1}

表1 配合物1的主要键长和键角

Table 1 Selected bond lengths (nm) and bond angles (°) for complex 1				
Cd1-O1	0.240 5(3)	Cd1-O3 ^b	0.231 6(4)	
Cd1-O2	0.237 1(4)	Cd1-O3 ^c	0.273 5(3)	
Cd1-O5	0.228 4(4)	Cd1-O4 ^c	0.224 6(4)	
Cd1-N1 ^a	0.244 9(4)			
O1-Cd1-O2	54.30(12)	O5-Cd1-N1 ^a	79.31(12)	
O1-Cd1-O5	88.43(12)	O3 ^b -Cd1-O5	84.25(12)	
O1-Cd1-N1 ^a	90.85(13)	O3 ^c -Cd1-O5	86.11(11)	
O1-Cd1-O3 ^b	91.03(12)	O4 ^c -Cd1-O5	133.60(13)	
O1-Cd1-O3 ^c	166.31(12)	O3 ^b -Cd1-N1 ^a	163.39(13)	
O1-Cd1-O4 ^c	137.27(13)	O3 ^c -Cd1-N1 ^a	100.44(12)	
O2-Cd1-O5	141.18(12)	O4 ^c -Cd1-N1 ^a	90.38(13)	
O2-Cd1-N1 ^a	89.75(12)	O3 ^b -Cd1-O3 ^c	75.95(11)	
O2-Cd1-O3 ^b	104.68(12)	$O3^{c}$ -Cd1-O4 ^c	99.36(12)	
O2-Cd1-O3 ^c	132.66(11)	O3 ^c -Cd1-O4 ^c	51.19(12)	
O2-Cd1-O4 ^c	83.00(13)			

Symmetry codes: ^a1+x, y, z; ^b-x, -1/2+y, 1/2-z; ^c1+x, 3/2-y, -1/2+z.

表 2 配合物 2 的主要键长和键角

Table 2 Selected bond lengths (nm) and bond angl	les (°) for complex 2
--	-----------------------

_				
	Cd1-O1	0.238 3(4)	Cd1-N1	0.225 0(4)
	Cd1-O2	0.233 0(4)	Cd1-O2 ^a	0.257 9(4)
	Cd1-O3	0.226 3(4)	Cd1-O4 ^b	0.236 7(4)
	Cd1-O4	0.259 6(4)		
	O1-Cd1-O2	55.19(11)	O3-Cd1-O4	56.21(11)
	O1-Cd1-O3	88.63(14)	O3-Cd1-N1	124.05(15)
	O1-Cd1-O4	110.73(11)	O2-Cd1-O3	82.79(11)
	O1-Cd1-N1	147.15(13)	O3-Cd1-O4 ^b	120.33(12)
	O1-Cd1-O2 ^a	106.64(10)	O4-Cd1-N1	88.23(13)
	O1-Cd1-O4 ^b	76.42(12)	O2 ^a -Cd1-O4	122.09(10)
	O2-Cd1-O3	126.91(11)	O2 ^a -Cd1-N1	83.10(12)

O2-Cd1-O4	162.77(11)	O4 ^b -Cd1-N1	83.04(13)
O2-Cd1-N1	100.13(12)	$O2^a$ -Cd1-O4 ^b	156.88(10)
O2-Cd1-O2 ^a	74.21(10)	O4-Cd1-O4 ^b	75.82(11)
O2-Cd1-O4 ^b	90.16(11)		

Symmetry codes: ^a-x, 2-y, 2-z; ^b1-x, 2-y, 2-z.

表3	配合物3	的主要键长和键角
----	------	----------

Table 3 Select	ed bond lengths (nn	n) and bond angles (°)	for complex 3
Cd1-O1	0.237 1(4)	Cd1-N3 ^a	0.229 0(5)
Cd1-O2	0.233 6(4)	Cd1-O3 ^b	0.231 6(4)
Cd1-N2	0.232 0(5)	Cd1-O4 ^b	0.229 5(4)
			106 50(12)
01-Cd1-02	55.65(15)	01-Cd1-O3	106.58(13)
O1-Cd1-N2	88.12(16)	O1-Cd1-O4 ^b	102.63(13)
O1-Cd1-N3 ^a	142.64(14)	O2-Cd1-N2	108.03(14)
O1-Cd1-O3 ^b	106.58(13)	O2-Cd1-N3 ^a	88.05(15)
O1-Cd1-O4 ^b	102.63(13)	O2-Cd1-O3 ^b	154.69(12)
O2-Cd1-N2	108.03(14)	O2-Cd1-O4 ^b	107.15(14)
O2-Cd1-N3 ^a	88.05(15)	N2-Cd1-N3 ^a	96.22(17)
O2-Cd1-O3 ^b	154.69(12)	O3 ^b -Cd1-N2	87.38(13)
O2-Cd1-O4 ^b	107.15(14)	O4 ^b -Cd1-N2	143.05(15)
O1-Cd1-O2	55.65(15)	O3 ^b -Cd1-N3 ^a	110.68(13)
O1-Cd1-N2	88.12(16)	O4 ^b -Cd1-N3 ^a	95.94(15)
O1-Cd1-N3 ^a	142.64(14)	O3 ^b -Cd1-O4 ^b	55.69(14)

Symmetry codes: ^a-1+x, y, z; ^bx, 1/2-y, -1/2+z.

表 4 配合物 1 的氢键 Table 4 Hydrogen bonds of complex 1					
D-H···A d (D-H) / nm d (D-H) / nm \angle DHA/(° nm \angle DHA/(°					
N1a-H1Aa…O1a	0.086	0.249	0.308 6(5)	127.00	
N1a-H1Ba…O4a	0.086	0.207	0.268 3(5)	128.00	
N1a-H1Aa…O5	0.086	0.225	0.302 3(5)	148.90	
O5-H5A…O1a	0.085	0.228	0.276 7(5)	117.00	
O5-H5B…O2b	0.085	0.220	0.273 0(5)	120.00	

表4 配合物1的氢键
Table 4 Hydrogen bonds of complex 1

Symmetry codes: a =1+x, y, z; b=1-x, -0.5+y, 0.5-z.

表5 配合物2的氢键	
------------	--

∠DHA/(°)
129.00

C8c-H8c····O2b	0.093	0.246	0.338 1(7)	171.00
N3c-H3Bc…O3c	0.089	0.213	0.266 9(10)	119.00
C11d-H11d····O3c	0.093	0.249	0.340 5(8)	167.00

Symmetry codes: a = x, -1+y, -1+z; b = -x, 2-y, 1-z; c = -x, 1-y, -z; d = -x, 1-y, 1-z.

表 6 配合物 3 的氢键 Table 6 Hydrogen bonds of complex 3

Ι	⊃-Н…А	<i>d</i> (D-H)/ nm	$d (H \cdots A)/nm$	$d (D \cdots A)/nm$	∠DHA/(°)
N1-	H1E…O2a	0.089	0.249	0.332 6(8)	156.00
N1	-H1F…O3	0.089	0.210	0.274 5(7)	128.00

Symmetry codes: a = 1/2+x, 1/2-y, 1-z.



图 1 化合物 1 (a)、2 (b)和 3 (c)的粉末 XRD 谱图

Fig.1 Experimental and simulated PXRD patterns of 1(a), 2 (b) and 3 (c)