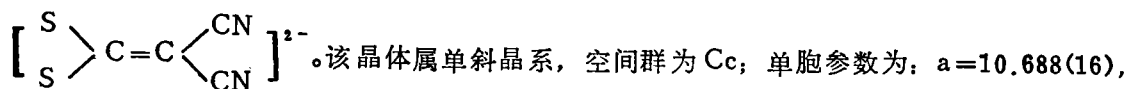


(QuinH)₃[Mo(imnt)₄]的晶体和分子结构

余秀芬 张汉辉 陈端辉

(化学化工系)

(QuinH)₃[Mo(imnt)₄] 整合物为黑色晶体。式中 Quin=C₉H₇N, imnt²⁻=



b=31.545(5), c=14.682(26) Å, β=109.28(14)°, 分子量M=1047。ρ_{obs}=1.50g/cm³, Z=4(ρ_{calc}=1.489g/cm³)。

在CAD-4 四圆衍射仪上收集三维衍射强度数据。用M₀-K_α射线, 以θ-2θ扫描方式, 在2°<θ<23°范围内, 得到4275个独立衍射点强度, 其中I>3σ(I)的衍射点为3241个。由强度计算结构振幅时, 经过LP因子校正, 但未作吸收校正。

结构的测定首先应用Patterson函数和直接法相结合的方法, 确定重原子M₀和八个次重原子S的坐标, 然后通过Fourier函数合成方法, 定出其它原子坐标, 最后依据I>3σ(I)的3241个独立衍射强度, 对63个非氢原子进行全矩阵最小二乘方修正(其中阳离子的30个原子只进行各向同性温度因子修正)。得到最后偏离因子R=0.075。

研究结果表明(见图1), M₀与四个双齿螯合配位体imnt²⁻的八个S原子组成近似D_{2d}对称性的十二面体结构。四个配位体分成两对分别与M₀组成了二个近于相互垂直的平面(平面S₁S₂S₃S₄M₀和平面S₅S₆S₇S₈M₀的面间角为92°)。在同一imnt²⁻中的S-S距离2.78~2.80Å和同一平面内不同imnt²⁻的S-S距离2.87~2.91Å都明显短于二倍硫的范德华半径3.70Å, 说明同一平面内的四个硫原子之间都有一定键合作

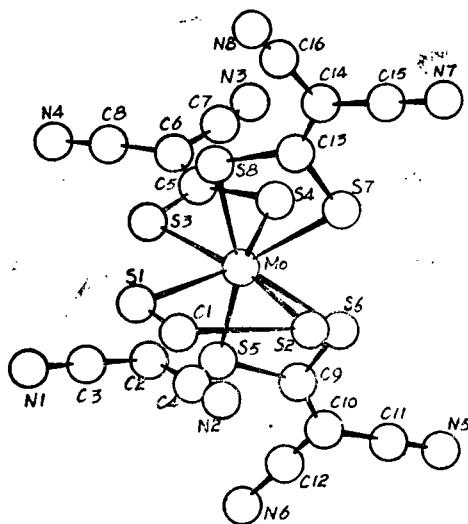


图1、络阴离子 [Mo(i-mnt)₄]²⁻结构沿Z轴投影

本文1983年1月25日收到

用。另外从不同平面的两组硫原子 S_1, S_2, S_4, S_6 和 S_3, S_5, S_7, S_8 相互之间距离 $3.16 \sim 3.32 \text{ \AA}$ 也短于硫的范德华距离, 说明它们之间也有微弱的键合作用。

详细的结构参数和结果讨论将另文报道。

CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF QUINOLINIUM TETRAKIS (1,1-DICYANOETHYLENE-2, 2-DITHIOLATE)MOLYBDENUM(V) $(\text{QuinH})_3 [\text{Mo}(\text{i-mnt})_4]$

Yu Xiufen, Zhang Hanhui and Chen Duanhui



我校召开首届学生学术讨论会

为活跃我校学生学术空气, 提高学生分析问题、解决问题和从事科学研究工作的能力, 由校科研处、教务处、团委会和学生会联合举办的我校首届学生学术讨论会于六月二日至三日召开。

这次讨论会共征集论文173篇, 作者达337人, 其中79级同学305人, 80级同学24人, 81级同学7人, 82级同学1人。物理无线电系、机械工程系、化学化工系、外国语系还先后召开了系学生学术讨论会。在六月二日至三日的全校学生首届学术讨论会上, 有15位同学报告了论文。

这次学生学术讨论会, 是对学生综合运用所学的基础理论、专业知识和基本技能以及解决实际问题能力的一次检阅。30%的79级同学参加了这次讨论会, 这对于即将走上独立工作岗位的同学也是一次很好的实战“练兵”活动。