

## シクロヘキサン-1,3-ジオンジオキシムと硝酸銅(II)から得られる三核銅錯体の構造の違い

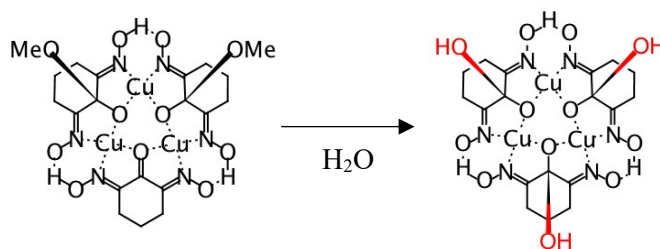
(日大院理工<sup>1</sup>・日大理工<sup>2</sup>) ○細谷 遥佑<sup>1</sup>・金城 はなか<sup>2</sup>・松田 大聖<sup>2</sup>・須川 晃資<sup>2</sup>・大月 穰<sup>2</sup>

Structural differences of trinuclear copper complexes obtained from cyclohexane-1,3-dione dioxime and copper(II) nitrate(<sup>1</sup>*Graduate School of Science and Technology, Nihon University*, <sup>2</sup>*College of Science and Technology, Nihon University*) ○Yosuke Hosoya,<sup>1</sup> Hanaka Kinjo,<sup>2</sup> Taisei Matsuda,<sup>2</sup> Kosuke Sugawa,<sup>2</sup> Joe Otsuki<sup>2</sup>

We obtained crystals of a trinuclear copper complex from cyclohexane-1,3-dione dioxime and copper(II) nitrate in methanol (space group :  $Cm$ ). The active methylene of the three ligands of the complex were oxidized into carbonyl groups. Two of the three ligands formed hemiacetal with methanol. This complex formed a one-dimensional chain by coordination bonds between copper(II) ions and oxygen atoms of the neighboring copper complex. When this trinuclear copper complex was recrystallized from neutral water, a similar complex was obtained, in which all ligands formed hemiacetal with water (space group :  $P\bar{1}$ ) (scheme 1) and the copper ions were coordinated with water molecules used as the solvent. When the crystal obtained from methanol was recrystallized from basic water, the structure of the complex molecule as well as the coordination mode were the same as those from neutral water (space group :  $P\bar{1}$ ), although the unit cell was.

**Keywords :** copper(II) nitrate; cyclohexane-1,3-dione dioxime; self-assembly; single crystal X-ray analysis; trinuclear copper complex

シクロヘキサン-1,3-ジオンジオキシムと硝酸銅(II)をメタノール中で混和すると三核銅錯体の結晶が得られた (空間群 :  $Cm$ )。この錯体では、構成する 3 つの配位子の活性メチレンがカルボニル基に酸化され、さらにこのうちの 2 つは溶媒のメタノールによりヘミアセタール構造を形成していた。また、この錯体は、銅イオンに隣接する錯体の酸素原子が配位結合することにより一次元鎖を形成していた。この三核銅錯体を中性の水から再結晶させると類似の錯体の結晶が得られたが (空間群 :  $P\bar{1}$ ) 構成する 3 つの配位子すべてが溶媒の水によりヘミアセタール構造を形成していた (スキーム 1)。この結晶はメタノールから得られたものとは異なり、銅イオンには溶媒で用いた水が配位結合していた。メタノールから得られた結晶を塩基性の水から再結晶させた場合も中性の水からの場合と同様の配位結合をしている結晶が形成したが (空間群 :  $P\bar{1}$ )、単位格子は異なっていた。



スキーム 1. 水中における三核銅錯体の変化