

Vol. 13, No. 1, 1384/2005 Spring & Summer



Synthesis and crystal structure analyses of Bis[N(2chloro-phenyl) 4-nitro-thiobenzamidato]mercury(II) complex

M. H. Habibi, S. Tangestaninejad, A. Fallah-Shojaie

Chemistry Department, Isfahan University, Isfahan, 81746, Iran E-mail: habibi@sci.ui.ac.ir

(Received: 3/5/2004, received in revised form: 10/1/2005)

Abstract: In this research N(2-chloro-phenyl)4-nitro-thiobenzamide as a ligand was synthesized. One mmol of mercury oxide was added to the solution of 1 mmol ligand in 45 ml chloroform and after 90 min the mixture through celite or BaS to remove unreacted mercury(II) compounds. The yellow crystals, which formed by slow evaporization, was separated and recrystallized from chloroform as fine yellow crystals with 87% yield and dried in vacuo. The crystal structure of above complex was determined by single crystal X-ray diffraction method. The complex crystals in a monoclinic unit cell with a = 8.2822(9) Å, b = 12.2907(9) Å, c = 13.1243(13) Å, $\alpha = 90^{\circ}$, $\beta = 98.729(5)^{\circ}$, $\gamma = 90^{\circ}$ and Z = 2 and space group P21/c. The S-Hg-S is linear with angle of 180°.

Keywords: Crystal structure, Mercury(II) complex, Thiobenzamide.

[Downloaded from ijcm.ir on 2025-07-18]



سال سیزدهم، شمارهٔ ۱، بهار و تابستان ۸۴، از صفحهٔ ۱۹ تا ۲۸



سنتز و بررسی ساختار بلوری کمپلکس بیس [N–(۲-کلرو فنیل) ۴– نیترو تیوبنز آمیداتو] جیوه(II)

محمد حسين حبيبي، شهرام تنگستاني نژاد، عبدالله فلاح شجاعي

گروه زمین شناسی گروه شیمی دانشگاه اصفهان. پست الکترونی: habibi@sci.ui.ac.ir

(دریافت مقاله ۸۳/۲/۱۳، دریافت نسخه نهایی ۸۳/۱۰/۲۰)

چکیده: در این کار پژوهشی نخست لیگاند N (۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمید (۱) سنتز شد سپس ۱ میلیمول اکسیدجیوه(II) به محلول حاوی ۱ میلیمول لیگاند (۱) در کلرفرم اضافه شد، بعد از ۹۰ دقیقه، مخلوط از میان celite یا BaS عبور داده شد تا ترکیبهای جیوه(II) واکنش نداده خارج شوند. بلورها با تبخیر آهسته حلال با بازده ۸۷٪ بهدست میآیند و در خلأ خشک میشوند. ساختار بلوری کمپلکس بیس[N-(۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمیداتو] جیوه(II) با خشک میشوند. ساختار بلوری کمپلکس بیس[N-(۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمیداتو] جیوه(II) با استفاده از پراش پرتو X تعیین شد. بلورهای کمپلکس در یک یاختهٔ یکهٔ تکمیل متبلور شدهاند. پارامترهای شبکهٔ آن Å (۹)/۲۹۲۲ می از ۹۰ (۲) ۲۲۹۰۷ - ۵۰ (۵) شدهاند. پارامترهای شبکهٔ آن Å (۹)/۲۹۲۲ می آن ۲۵/۲۹ است. پیوند S-Hg-۶ خطی بوده و زاویه آن ۱۵۰۰ است.

واژههای کلیدی: پراش سنجی پرتو X ، ساختار بلوری و مولکولی ، کمپلکس جیوه(II) ، تیو بنزآمید.

مقدمه

مطالعهٔ همآرایی و ساختار شیمیایی کمپلکسهای جیوه(II) با لیگاندهای شامل انواع متفاوت اتمهای دهنده مانند ازت، گوگرد و اکسیژن در چند دههٔ گذشته مورد توجه قرار گرفته است. مطالعهٔ کمپلکسهای جیوه(II) با لیگاندهای سولفوردار به درک بهتر برهمکنشهایی که بین جیوه(II) و سیستئین در سیستمهای طبیعی وجود دارنـد کمک میکنـد [۱ و ۸]. همچنـین بهطور مشابه سمیت جیوه بهوسیلهٔ متالوتیونین، به تشکیل بانـد سولفور – جیوه(II) در ایـن ترکیبها نسبت داده میشود [۹].بدین منظـور تلاشهای زیـادی انجـام شـده است تـا شـیمی همآرایـی جیـوه(II) بـا لیگاندهای دارای اتـم سولفور، ماننـد فنیـل تیولاتهـا [۱۰]، تیونهـای چندچرخهای، مثل پیریدین-۲ – تیول [۱۱] و ایمیدازولین ۲ – (۳–۱۲) تیونها [۱۲] توسـعه یابـد. (۲- پیریدین تیولاتو) جیوه(II) را گزارش کردهایم [۳۱ و ۱۴] در این کار پژوهـشی از واکـنش ایـازگی ما نیز سنتز و کاربرد کمپلکسهای بیس(۲ – مرکاپتو بنزواکسازولات)جیـوه(II) و بـیس ۲-کلرو آنیلین با ۴ – نیترو بنزوئیل کلراید و سپس واکنش با سولفید فسفر، لیگانـد (۱ (۲-کلـرو فنیل)۴ –نیترو تیوبنزآمید (۱) را سـنتز کـردیم [۵۵ و ۱۶] و متعاقبـاً از واکـنش لیگانـد (۱) بـا اکسید جیوه(II) در کلرفرم کمپلکس بیس[N – (۲ –کلرو فنیل) ۴ – نیترو تیوبنزآمیداتو]جیوه(II)

روش تجربی

۱- تهیهٔ لیگاند N (۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمید
از واکنش ۲- کلرو آنیلین با ۴- نیترو بنزوئیل کلراید و متعاقبا واکنش با سولفید فسفر طبق مقاله های [۵۵ و ۱۶] لیگاند (۱) تهیه شد.
۲- تهیه کمپلکس بیس [N-(۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمیداتو]جیوه(II) [2(Ncpntb]]
۲- تهیه کمپلکس بیس [N-(۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمیداتو]جیوه(II) [2(Ncpntb)]
یک میلیمول از اکسید جیوه(II)، g ۲۱۶، به محلولی از ۱ میلیمول N (۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمید و برای ۹۰ دقیقه بههم زده یک میلیمول از اکسید جیوه(II) و در دمای اتاق اضافه شد و برای ۹۰ دقیقه بههم زده شد، تکمیل واکنش به روش رنگنگاری لایهٔ نازک (cll) و با مخلوط حلالهای CCl4/CH₃OH و به نسبت ۱۵۰۱ دنبال شد. سپس مخلوط واکنشداده از میان tell و ای یا Saga به مد تا به نسبت ۱۵۰۱ دنبال شد. سپس مخلوط واکنشداده از میان tell و تک بلورهای ترکیبهای جیوه(II) و تک بلورها با تبخیر آهستهٔ حـلال و تک بلورهای ترکیبهای زرد رنگ در کلرفرم با بازده ۸۷٪ به وجود میآیند و در خلا خشک میشوند.

بحث و برداشت

واکنش N (۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمید با اکسید جیوه(II) موجب تشکیل کمپلکس بیس [N-(۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنزآمیداتو]جیوه(II) [Hg(Ncpntb)2] با بازده خوب شد. این کمپلکس با استفاده از 1H-NMR و IR شناسایی شد. کمپلکس [Hg(Ncpntb)2] حبيبى، تنگستانىنژاد، فلاحشجاعى

زرد رنگ و لیگاند اولیه زرد مایل به نارنجی است. کمپلکس در $^{\circ}$ ۲۱۲/۶ ذوب میشود در صورتی که نقطهٔ ذوب لیگاند $^{\circ}$ ۱۵۱[°] است. در طیف H-NMR لیگاند، قلهٔ H- N در $^{\circ}$ در $^{\circ}$ طاهر شده و در کمپلکس، به علت تشکیل پیوند C=N، قلهٔ یادشده حذف شده است. با تشکیل ظاهر شده و در کمپلکس، به علت تشکیل پیوند C=N، قلهٔ یادشده حذف شده است. با تشکیل کمپلکس، چگالی الکترونی حلقه بنزنی مجاور اتم $^{\circ}$ وگرد کمتر شده و بنابراین هیدروژنهای حلقه بنزنی مجاور اتم $^{\circ}$ وگرد کمتر شده و بنابراین هیدروژنهای حلقه بنزنی به سمت مقادیر δ بیشتر جابهجا شدهاند، از طرف دیگر با افزایش چگالی الکترونی اطراف اتم ازت، هیدروژنهای حلقه بنزنی مجاور اتم ازت به سمت مقادیر δ کمتر جابهجا شده- دف شده است. و دارای قلهٔ بسیار شاخص C=N اطراف اتم ازت، هیدروژنهای حلقه بنزنی مجاور اتم ازت به سمت مقادیر δ کمتر جابهجا شده- (پیوند I تیوآمید، $^{\circ}$ کمتر میلای جابهجا شده- (پیوند I تیوآمید، $^{\circ}$ این و دارای قلهٔ بسیار شاخص $^{\circ}$ در ولراف اتم ازت، هیدروژنهای حلقه بنزنی مجاور اتم ازت به سمت مقادیر δ کمتر جابهجا شده- (پیوند I تیوآمید، $^{\circ}$ می در وژنهای حلقه بنزنی مجاور اتم ازت به سمت مقادیر δ کمتر جابهجا شده- (پیوند I تیوآمید، $^{\circ}$ می در وزیای در ای الالالاف اتم ازت به سمت مقادیر δ کمتر جابهجا شده است. (پیوند I تیوآمید، $^{\circ}$ می در شکل ۱۰ نشان داده شده است. (پیوند I تیوآمید، $^{\circ}$) به سمت مقادیر $^{\circ}$ کمتر جابهجا شده است. (مول پیوند II تیوآمید، $^{\circ}$) به سمت مقادیر $^{\circ}$ کمتر جابهجا شده است. (مردو که به علت کاهش میزان مشارکت پیوند π ، در مقایسه با $^{\circ}$ کمتر جابهجا میدان می (کار است، که به علت کاهش میزان مشارکت پیوند π ، در مقایسه با $^{\circ}$ (۱/۲۷۵) بهعلت افزایش میزان مشارکت پیوند π ، در مقایسه با $^{\circ}$ (۱/۲۷۵) به علت افزایش میزان مشارکت پیوند π ، در مقایسه با (۱/۲۷۵) به علت افزایش میزان مشارکت پیوند π ، در مقایسه با (۱/۲۷۵) به دا از ای می میزان مشارکت پیوند π نوایس می در می در آزاد مشابه ($^{\circ}$

جدول ۱ اطلاعات A in ppm from CDCl₃) H-NMR) لیگاند(۱) و کمپلکس [Hg(Ncpntb)].

	N-H	o-tb	o-C6H4	m-tb	M-C6H4	p- C6H4
NcpntbH	۹٫۳۵	٨,٣	۷,۶	٨,١	۷٫۲۱–۷٫۴۰	۷,۶
[Hg(Ncpntb)2]	-	٨,٣۶	۶,۲۶	۸٫۲۷	V,YS-V,FS	۶٫۸

[Hg(Ncpntb)₂] جدول ۲ برخی از مهمترین ارتعاشهای IR لیگاند (۱) و کمپلکس (Hg(Ncpntb)₂) (د. این جدول داریم: ضعیف = m ، متوسط = w و قوی = s).

	-,,				
	V(NH)		يد	بوندهای تیوآم	<u>ب</u>
	V(IVII)	Ι	II	III	Ι
NcpntbH	۳۳۲۸т	۱۵۹۵m	۱۲۰۷m	۹۳۰₩	۷۳۲ و ۶۶۵ w
[Hg(Ncpntb) ₂]	-	۱۶۰۵vs	۱۱۸۵s	۹۲۳vs	۷۴۳ و ۶۱۶ m

۱- مرجع [۱۹] را ببینید.



شكل ۱ ساختار مولكولى كمپلكس [Hg(Ncpntb)2] .

[Hg(Ncpntb)₁](II) اندازه گیریها با پراش سنج (II) Nonius Kappa CCD و با تابش Mo-K_a اندازه گیریها با پراش سنج SHELXS-97 و Nonius Kappa CCD و با تابش SHELXS-97 و شد. موقعیت اتمهای غیرهیدروژن از روش مستقیم، با استفاده از برنامهٔ 97-97 و پالایش شده با SHELXS-97 محاسبه شد. پالایش حداقل مربعات بر پایهٔ مقدار F۲ برای همه دادهها انجام شد. شمای وزنی کمپلکس، از رابطهٔ زیر به دست آمد: $W^{-1} = \sigma^{r}(F, T) + (\sqrt{r} \delta \Lambda T SP)^{r} + (\sqrt{r} \delta T SP)$

که در آن، P عبارتست از: ۳/(P = (F.^۲ + F_C) . مقدار نهایی Rw برای همهٔ دادهها از رابطهٔ زیـر به دست میآید:

 $R_{W} = \left[\sum w \left(F^{\dagger} - F^{\dagger}_{C} \right)^{r} / \sum w \left(F^{\dagger}_{.} \right)^{r} \right]^{\cdot/\Delta} = \cdot_{/} \cdot \mathfrak{rqk}$

اطلاعات ساختار بلوری کمپلکس در جدول ۳ و مختصات اتمها در جدول ۴ و طول پیوند و زوایههای پیوندی در جدول ۵ ارائه شدهاند. بررسی ساختار نشان میدهد که گروههای تیو بنزآمید از طریق اتم گوگرد به جیوه متصل بوده و زاویهٔ S-Hg-S برابر ۱۸۰۰ است. آرایش هندسی در اطراف Hg به صورت خطی است. با توجه به اینکه گروه فضایی کمپلکس P2₁/c و مقدار Z آن، ۲ است، مولکول روی موقعیت ویژه مرکز تقارن قرار دارد و مرکز تقارن مولکول بر مرکز تقارن گروه فضایی منطبق

Chemical formula	$C_{26}H_{16}Cl_2HgN_4O_4S_2$		
Formula weight	YX۴/۰۴		
Temperature	۱۵۰(۲) K		
Radiation, wavelength	Μο Κα و ۲/۱۰٬۳۰ Å		
Crystal system, space group	monoclinic, $P2_1/c$		
Unit cell parameters	$a = \lambda_{/} \tau \lambda \tau \tau (\mathfrak{q}) A^{o}$		
	$b = \mathrm{i} \mathrm{Y}_{\mathrm{i}} \mathrm{Y} \mathrm{q} \cdot \mathrm{Y} \mathrm{q} \mathrm{i} \mathrm{A}^{\mathrm{o}} \qquad \qquad \beta = \mathrm{q} \mathrm{A}_{\mathrm{i}} \mathrm{Y} \mathrm{Y} \mathrm{q} \mathrm{(a)}^{\mathrm{o}}$		
	$\mathbf{c} = \mathbf{i} \mathbf{r}_{i} \mathbf{i} \mathbf{r} \mathbf{f} \mathbf{r} (\mathbf{i} \mathbf{r}) \mathbf{A}^{\mathrm{o}}$		
Cell volume	$\mathfrak{l}\mathfrak{r}_{\prime}\mathfrak{l}\mathfrak{r}\mathfrak{r}\mathfrak{r}(\mathfrak{l}\mathfrak{r})A^{\mathrm{or}}$		
Z	٢		
Calculated density	NANK g/cmr		
Absorption coefficient μ	۶,۲۳۱mm ⁻¹		
F(000)	۲۵۶		
Crystal colour and size	Yellow $_{\mathfrak{I}}\cdot_{\mathfrak{I}}\mathfrak{r}\mathfrak{l}\times\cdot_{\mathfrak{I}}\mathfrak{r}\mathfrak{r}\times\cdot_{\mathfrak{I}}\mathfrak{r}\mathfrak{r}\times\cdot_{\mathfrak{I}}\mathfrak{r}\mathfrak{r}$		
Reflections for cell refinement	<i>ΥΥ۶</i> (θ range $Υ_{/Δ}$ to $Υ_{Δ/·°}$)		
Data collection method	Nonius KappaCCD diffractometer		
	ϕ and ω scans		
θ range for data collection	۴/۲ ت ۲۵/۰°		
Index ranges	-9 < h < 9 و $-11 < k < 14$ و $-10 < l < 14$		
Completeness to $\theta = \gamma \Delta / \cdot^{\circ}$	λ٩,Υ ٪.		
Reflections collected	8787		
Independent reflections	$\Upsilon \cdot \Upsilon (\text{Rint} = \cdot / \cdot \Upsilon \Upsilon)$		
Reflections with F2>Yo	1498		
Absorption correction	numerical		
Min. and max. transmission	\cdot /tfr and \cdot /trv		
Structure solution	direct methods		
Refinement method	Full-matrix least-squares on F2		
Weighting parameters a, b	••••••, 1/818•		
Data / restraints / parameters	T. 9V / . / IVA		
Final R indices [F2>ro]	$R1 = \cdot_{\prime} \cdot \iota vr$, $wR2 = \cdot_{\prime} \cdot rrs$		
R indices (all data)	$R1 = \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot \cdot RR$, $WR2 = \cdot $		
Goodness-of-fit on F2	۱/۰ <i>۷۶</i>		
Largest and mean shift/su	$\cdot_{/}\cdots$ and $\cdot_{/}\cdots$		
Largest diff. peak and hole	$\cdot_{/}$ $\wedge \cdot$ and $-\cdot_{/}$ $\Delta \wedge e \ A^{-r}$		

جدول ۳ داده های بلوری کمپلکس بیس [N-(۲-کلرو فنیل) ۴- نیترو تیوبنز آمیداتو]جیوه(II) [Hg(Ncpntb)2]

	х	У	Ζ	Ueq
Hg(1)	• / \ \ • •	• / • • • •	\mathbf{v}_{i}	۰ _/ ۰ ۱۸۴۸(۸)
S(1)	•,80149(17)	•,• 4227(9)	۱٬۱۵۲۶۸(۲)	• ، • ٣٣٨(٨)
Cl(1)	•,&*988(10)	•,٣۴٧۶۴(١١)	١,٩٧۴٩٨(١٠)	۰,·۴۹۴(۸)
N(1)	۰,۸۶۶۴(۴)	•,1827(3)	1,•878(7)	۰,۰۲۵۴(۸)
N(7)	1,7887(4)	•,٢١۶٨(٣)	١/۵١٧٩(٣)	۰,۰۲۶۹(۸)
O(1)	1,7878(4)	•/1424(٣)	1,0247(2)	۰٬۰۳۷۴(۸)
O(7)	1/298.(4)	•,*•٧۴(*)	1,0818(2)	۰٬۰۴۴۵(۹)
C(1)	۰,YY۱۵(۵)	•/1484(4)	•،٩۵٣٨(٣)	•,•*******
C(7)	۰,۶۶۷۲(۵)	•,٢٣٠.(۴)	۰٬۹۰۷۸(۳)	•,•٣١۶(١١)
C(٣)	۰,۵۸۱۶(۵)	•,7181(4)	۰ _/ ۸۰۷۷(۳)	•,•٣۶۵(١٢)
C(۴)	۰ _/ ۶۰۵۲(۵)	۰٬۱۲۳۹(۵)	·/YQEI(T)	•,•۴۱۵(۱۳)
C(۵)	۰,۷۱۰۲(۵)	•,• 471(4)	•/٧٩٧٢(٣)	•,•۴۱۱(۱۳)
C(۶)	۰ _/ ۷۹۷۴(۵)	۰ _/ •۵۳۸(۴)	۰, ۸۹۶۷(۳)	۰,۰۲ ۸۹(۱۰)
C(Y)	• _/ λ۲۹۱(۵)	•/174•(٣)	1,1848(4)	۰ _/ ۰۲۰۴(۹)
C(A)	· ٫٩۴·۵(۴)	•,1400(4)	1,7841(4)	۰ _/ •۱۵۶(۹)
C(٩)	۱٬۰۱۸۵(۵)	•,7481(4)	1,7497(3)	•,• ٢٣٢(٩)
$C(1\cdot)$	۱,۱۱۲۶(۵)	•,77••(٣)	1,8418(8)	·/·۲۶۵(۱·)
C(11)	۱٬۱۳۸۷(۴)	•/1917(٣)	1,4142(4)	۰ _/ ۰۲۰۲(۹)
C(17)	۱٬۰۶۹۳(۵)	۰/• ۲۹۹(۳)	1/4.48(4)	•,• ٢٢۴(٩)
C(17)	۰,۹۶۶۵(۵)	۰/۰۶۸۱(۳)	1/8181(8)	•,•٢٢٨(٩)

جدول ۴ مختصات اتمها و پارامترهای جابهجایی ایزوتوپیک کمپلکس [Hg(Ncpntb)2].

Hg(1)-S(1)	۲٫۳۴۳۳(۱۰)	Hg(1)-S(1)	۲,۳۴۳۳(۱۰)
S(1)-C(Y)	1,740(4)	Cl(1)-C(7)	1,878(D)
N(1)-C(1)	1,474(0)	N(1)-C(Y)	1,740(0)
$N(\tau) - O(\tau)$	1,779(4)	$N(\tau) - O(\tau)$	1,771(4)
$N(\tau)-C(11)$	1,474(0)	C(1)-C(7)	1, 890(8)
$C(1)-C(\beta)$	1,477(8)	$C(\tau) - C(\tau)$	1,4.0(8)
$C(\tau)-H(\tau)$. 90	$C(\tau) - C(\tau)$	1,77977(7)
C(f)-H(f)		$C(f)-C(\Delta)$	1, 37, 37 (8)
$C(\Delta)-H(\Delta)$		$C(\Delta) - C(\beta)$	1,899(8)
C(r)-H(r)	• ,90• •	$C(Y) - C(\Lambda)$	1,0.1(0)
$C(\Lambda)-C(9)$	1,890(8)	$C(\Lambda) - C(1\pi)$	1,891(0)
C(9)-H(9)	• ,90• •	C(9)-C(1)	1,886(8)
$C(1 \cdot) - H(1 \cdot)$	• ,90• •	$C(1 \cdot) - C(11)$	1, 377 (0)
C(11)-C(17)	1,771(2)	C(17)-H(17)	. 90
C(17)–C(17)	۱٬۳۷۱(۵)	С(1т)–Н(1т)	۰,۹۵۰۰
S(1) - Hg(1) - S(1#1)	14.	Hg(y) - S(y) - C(y)	۱۰۹٬۵۰(۱۳)
C(1) - N(1) - C(Y)	177,4(*)	O(1) - N(T) - O(T)	175,5(7)
O(1)-N(7)-C(11)	117,9(4)	O(t) - N(t) - C(1)	114,4(4)
N(1)-C(1)-C(T)	17. 11(4)	N(1)-C(1)-C(2)	119,0(4)
$C(\tau)-C(\tau)-C(\rho)$	119,4(4)	$Cl(1)-C(\tau)-C(1)$	۱۱۹ ۸(۳)
$Cl(1)-C(\tau)-C(\tau)$	119,4(4)	C(1)-C(T)-C(T)	17.8(4)
$C(\tau)-C(\tau)-H(\tau)$	17.7	$C(\tau)-C(\tau)-C(\tau)$	119,0(4)
$H(\tau)-C(\tau)-C(\tau)$	17.0	$C(\tau)-C(\tau)-H(\tau)$	119,0
$C(\tau)-C(\tau)-C(\Delta)$	171/1(4)	$H(f)-C(f)-C(\Delta)$	119,0
$C(f)-C(\Delta)-H(\Delta)$	119,4	$C(r)-C(\delta)-C(r)$	151,5(0)
$H(\Delta)-C(\Delta)-C(\beta)$	119,4	$C(1)-C(\beta)-C(\Delta)$	111/1(4)
$C(1)-C(\beta)-H(\beta)$	15.9	$C(\Delta)-C(\beta)-H(\beta)$	١٢٠/٩
S(1)-C(Y)-N(1)	181,8(8)	S(1)-C(Y)-C(A)	11.4(٣)
N(1)-C(Y)-C(A)	۱۱۸/۰(۳)	$C(Y)-C(\Lambda)-C(\mathfrak{q})$	۱۱۹٫۳(۳)
$C(Y)-C(\Lambda)-C(\Lambda T)$	171,7(4)	$C(9)-C(\lambda)-C(1\pi)$	119,.(4)
$C(\Lambda)-C(\eta)-H(\eta)$	۱۱۹,۶	$C(\Lambda)-C(\eta)-C(\eta)$	۱۲۰٫۸(۴)
$H(\mathfrak{q})-C(\mathfrak{q})-C(\mathfrak{l}\cdot)$	119,8	C(9)-C(1)-H(1)	۱۲۰/۹
C(9)-C(1)-C(1)	۱۱۸٫۳(۴)	$H(1 \cdot) - C(1 \cdot) - C(1 \cdot)$	۱۲۰٫۹
$N(\tau)-C(11)-C(1\cdot)$	119,77(4)	$N(\tau)-C(\tau)-C(\tau)$	۱۱۸٫۲(۴)
$C(1 \cdot)-C(11)-C(17)$	122/0(3)	C(11)-C(17)-H(17)	٧, • ٢ ١
C(11)-C(17)-C(17)	111,8(4)	H(17)-C(17)-C(17)	٧, • ٢ ١
$C(\Lambda)-C(1\pi)-C(1\pi)$	17.14(4)	$C(\Lambda)-C(1\tau)-H(1\tau)$	۱ ۱ ۹ _/ ۷
C(17)-C(17)-H(17)	۱ ۱ ۹ _/ ۷		

جدول ۵ برخی اطلاعات مربوط به طول پیوند (pm) و زوایای پیوندی برای کمپلکس [Hg(Ncpntb]] با مقدارهای انحراف استاندارد تخمینی (e.s.d.s) در داخل پرانتز.

Symmetry operations for equivalent atoms

#1 -x,-y+2,-z+1

تشکر و قدردانی

مراجع

مؤلفین وظیفه خود میدانند کـه از دانـشگاه اصـفهان و نیـز از پروفـسور William Clegg از بخـش شـیمی دانـشگاه نیوکاسـتل انگلـستان University of Newcastle بـه خـاطر اندازه گیریهای پراش پرتو X سپاسگزاری نمایند.

[1] Santos K. K., Gruff E. S., Koch S. A., Harbinson G. A., J. Am. Chem. Soc. 113 (1991) 469.

[2] Jiang D. T., Heald S. M., Sham T. K., Stillman M. J., J. Am. Chem. Soc. 116 (1994) 11004.

[3] Fleissner G., Kozlowski P. M., Bryson J. W., Ohalloran T. V., Spiro T. G., Inorg. Chem. 38 (1999) 3523.

[4] Gruff E. S., Koch E. S.A., J. Am. Chem. Soc. 112 (1990) 1245.

[5] Barrera H., Bayon J. C., Gonzalez-Duarte P., Sola J., Vinas M. M., Polyhedrn 1 (1982) 647.

[6] Christou G., Folting K., Huffman J. C., Polyhedron 3 (1984) 1247.

[7] Carlton L., White D., Polyhedron 9 (1990) 2717.

[8] Schultz P. G., Au K. G., Walsh C. T. Biochemistry 24 (1985) 6840.

[9] Kagi, J. H. R., Vallee, B. L., J. Biol. Chem., 236 (1961) 2435.

[10a] Christou G., Folting K., Huffman J. C., Polyhedron 3 (1984) 1247.

[10b] Carson G. K., Dean P. A. W., Inorg. Chem. Acta 66 (1982) 157.

[11] Contreras J. G., Seguel G. V., Alderete J. B., Spectrochim. Acta Part A, 50 (1994) 371.

[12] Shummugam R., Sathyanarayana D. N., J. Coord. Chem. 12 (1983) 151.

[13] Habibi M. H., Tangestaninejad S., Montazerozohori M., Mohammadpour-baltork I., Molecules 8 (2003) 663.

[14] Amini M. K., Rafi A., Ghaedi M., Habibi M. H., Zohory M. M., Microchem. J. 75 (2003) 143.

[15] Scheeren J. W., Ooms P. H. J., Nivard R. J. F., Synthesis (1973) 149.

[16] Perregard J., Thomeson L., Lawesson S. O., Bull. Soc. Chim. Belg. 86 (1977) 321.

[17] Raper E. S., Oughtred R. E., Nowell I. W., Inorg. Chim. Acta 77 (1983)L89.

[18] Raper E. S., Oughtred R. E., Nowell I. W., Creighton J. R., Acta Crystallogr. Sect. B 39 (1983) 355.

[19] Creighton J. R., Gardiner D. S., Gorvin A. C., Gutteridge C., Jackson A.

R. W., Raper E. S., Sherwood P. M. A., Inorg. Chim. Acta 103 (1985) 195.