

## C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>O<sub>2</sub>N<sub>3</sub>CuCl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O의 결정 구조

김문집 · 김영수 · 최기영<sup>a</sup>

순천향대학교 물리학과, <sup>a</sup>공주대학교 화학교육과

## C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>O<sub>2</sub>N<sub>3</sub>CuCl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O

Moon-Jib Kim, Young-Soo Kim and Ki-Young Choi<sup>a</sup>

Department of Physics, Soonchunhyang University, Asan, Chungnam 336-745, Korea

<sup>a</sup>Department of Chemistry Education, Kongju National University, Kongju, Chungnam 314-701, Korea

### 요 약

X-선 회절법을 이용하여 C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>O<sub>2</sub>N<sub>3</sub>CuCl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O의 분자 및 결정구조를 해석하였다. 이 결정의 결정계는 Triclinic이고 공간군은 P1이며, 단위포 상수는  $a = 7.6202(9) \text{ \AA}$ ,  $b = 8.5943(7) \text{ \AA}$ ,  $c = 8.6272(6) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 67.518(6)^\circ$ ,  $\beta = 68.043(8)^\circ$ ,  $\gamma = 74.370(8)^\circ$ ,  $V = 478.89(8) \text{ \AA}^3$ ,  $T = 295 \text{ K}$ ,  $Z = 1$ ,  $D_c = 1.504 \text{ Mgm}^{-3}$ 이다. 회절반점들의 세기는 Enraf-Nonius CAD-4 Diffractometer로 얻었으며 graphite로 단색화한 MoK $\alpha$ 선( $\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$ )을 사용하였다. 분자구조는 Direct method로 풀었으며,  $F_0 > 4\sigma(F_0)$ 인 1659개의 독립회절데이터에 대하여 최소 사승법으로 234개의 변수를 정밀화 하여 최종 신뢰도 값  $R = 2.47\%$ 를 얻었다.

### Abstract

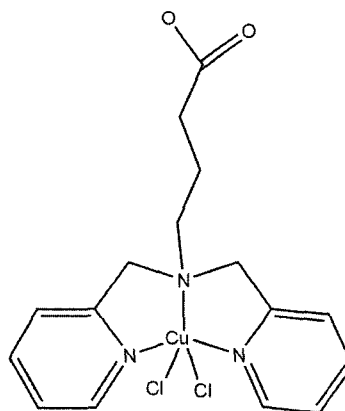
The structure of C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>O<sub>2</sub>N<sub>3</sub>CuCl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O has been determined by X-ray diffraction methods. The crystal system is triclinic, space group P1, unit cell constants,  $a = 7.6202(9) \text{ \AA}$ ,  $b = 8.5943(7) \text{ \AA}$ ,  $c = 8.6272(6) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 67.518(6)^\circ$ ,  $\beta = 68.043(8)^\circ$ ,  $\gamma = 74.370(8)^\circ$ ,  $V = 478.89(8) \text{ \AA}^3$ ,  $T = 295 \text{ K}$ ,  $Z = 1$ ,  $D_c = 1.504 \text{ Mgm}^{-3}$ . The intensity data were collected on an Enraf-Nonius CAD-4 Diffractometer with graphite monochromated MoK $\alpha$  radiation ( $\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$ ). The molecular structure was solved by direct methods and refined by full-matrix least squares to a final  $R = 2.47\%$  for 1659 unique observed  $F_0 > 4\sigma(F_0)$  reflections and 234 parameters.

### 1. 서 론

X-선 회절법에 의한 단결정의 3차원적 구조를 해명함으로써 분자내 원자간의 결합길이와 결합각을 얻을 수 있고 분자의 conformation, 평면성들과 단위세포 내의 분자들의 배열 등을 상세히 규명할 수 있다.

수많은 과학자들은 간단한 분자에서 거대 분자 즉 단백질, 핵산 등에 대한 구조를 활발히 연구하며, 특히 biological activities가 있는 물질의 분자구조를 밝히려고 노력하고 있다.

본 실험에서는 C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>O<sub>2</sub>N<sub>3</sub>CuCl<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O [Scheme I]



[Scheme I]

의 3차원적 결합 및 분자구조를 단결정 X-선 회절법으로 밝혀냄으로써 분자 내에서 원자들의 결합 길이, 결합각과 conformation 및 평면성을 검토하고 분자들의 배열을 해석하는데 이 연구의 목적을 둔다.

## 2. 실험

본 실험에서 사용한  $C_{16}H_{19}O_2N_3CuCl_2$ 의 단결정은 청색의 육면체형으로 크기는  $0.2 \times 0.3 \times 0.3$

**Table 1. Experimental data  $C_{16}H_{19}O_2N_3CuCl_2$ .**

Crystal data	Mo $K\alpha$ radiation
$[C_{16}H_{19}O_2N_3CuCl_2]$	$\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$
$M_r = 433.77$	Cell parameters from 25 reflections
Triclinic	$\theta = 8.57^\circ \sim 15.85^\circ$
$P1$	$\mu = 1.43 \text{ mm}^{-1}$
$a = 7.6202(9) \text{ \AA}$	$T = 295 \text{ K}$
$b = 8.5943(7) \text{ \AA}$	Block
$c = 8.6272(6) \text{ \AA}$	
$\alpha = 67.518(6)^\circ$	
$\beta = 91.614(9)^\circ$	
$\gamma = 74.370(8)^\circ$	
$V = 478.89(8) \text{ \AA}^3$	
$Z = 1$	$0.2 \times 0.3 \times 0.3 \text{ mm}$
$D_x = 1.504 \text{ Mgm}^{-3}$	blue
Data collection	
Enraf-Nonius CAD-4 diffractometer	$\theta_{\max} = 25^\circ$
$\omega/2\theta$ scans	$h = -8 \rightarrow 9$
Absorption correction : PSI scan	$k = -9 \rightarrow 10$
1809 measured reflections	$l = 0 \rightarrow 10$
1685 independent reflections	3 standard reflections monitored every 200 reflections
	intensity decay : none
Refinement	
Refinement on $F^2$	
$R = 0.0247$	$(\Delta/\sigma)_{\max} = 0.000$
$S = 1.083$	$\Delta\rho_{\max} = 0.605 \text{ e\AA}^{-3}$
$wR = 0.0609$	$\Delta\rho_{\min} = -0.352 \text{ e\AA}^{-3}$
1659 reflections [ $F_o > 4\sigma(F_o)$ ]	Extinction coefficient : none
234 parameters	Atomic scattering factors from International Tables for X-ray Crystallography (1992, vol. C, tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4)
All H-atoms parameters refined	
$w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0718612 \times P)^2]$	
where	
$P = [\text{Max}(F_o^2, 0) + 2 \times F_c^2]/3$	

mm이다.  $8.57^\circ \leq \theta \leq 15.85^\circ$  사이에 25개 회절반점을 측정하여  $a = 7.6202(9) \text{ \AA}$ ,  $b = 8.5943(7) \text{ \AA}$ ,  $c = 8.6272(6) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 67.518(6)^\circ$ ,  $\beta = 68.043(8)^\circ$ ,  $\gamma = 74.370(8)^\circ$  이고,  $V = 478.89(8) \text{ \AA}^3$  결정계는 Triclinic, 단위포당 분자수는  $Z = 1$ 임을 알았다. 회절데이터측정은  $2.59^\circ \leq \theta \leq 24.97^\circ$ ,  $-8 \leq h \leq 9$ ,  $-9 \leq k \leq 10$ ,  $0 \leq l \leq 10$  사이에서 1809개의 회절데이터를 수집하였으며, 독립회절반점수는 1685개이다. 사용한 X-ray Diffractometer는 Enraf-Nonius CAD-4, 파장은 graphite로 단색화한  $MoK\alpha$ 이고  $w/2\theta$ 로 scan하였다. 측정된 회절데이터는 Lorentz-Polarization factor를 보정하였으며, PSI scan을 하여 흡수 보정을 하였다. 측정된 회절데이터로부터 특별한 소멸관계가 없고,  $Z = 4$ 이라는 사실로부터 공간군이  $P1$ 임을 알았다. 수소를 제외한 24개 원자

**Table 2. Fractional atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters ( $\text{\AA}^2$ ) for non-hydrogen atoms of  $C_{16}H_{19}O_2N_3CuCl_2$ . The e.s.d.'s are in parentheses.**

$$U_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i a_j$$

Atom	x	y	z	U(eq)
Cu	0.9227(1)	0.4147(1)	0.3324(1)	0.035(1)
Cl(1)	1.2454(1)	0.4335(1)	0.3348(1)	0.047(1)
Cl(2)	0.9001(2)	0.1387(1)	0.3946(2)	0.064(1)
N(1)	0.8180(4)	0.6696(3)	0.2725(3)	0.031(1)
N(2)	1.0074(4)	0.4775(4)	0.0677(4)	0.040(1)
N(3)	0.7856(5)	0.4272(4)	0.5789(4)	0.039(1)
O(1)	0.2952(4)	0.9886(4)	-0.1016(4)	0.057(1)
O(2)	0.5977(4)	0.9402(4)	-0.1033(4)	0.049(1)
C(1)	0.9439(5)	0.7561(5)	0.1007(5)	0.040(1)
C(2)	1.0091(5)	0.6448(5)	-0.0154(5)	0.041(1)
C(3)	1.0737(6)	0.7102(7)	-0.1984(5)	0.054(1)
C(4)	1.1405(7)	0.6000(8)	-0.2950(6)	0.063(1)
C(5)	1.1374(7)	0.4288(8)	-0.2097(6)	0.063(1)
C(6)	1.0688(6)	0.3720(6)	-0.0285(6)	0.055(1)
C(7)	0.8194(5)	0.7203(4)	0.4179(5)	0.037(1)
C(8)	0.7452(5)	0.5857(4)	0.5882(4)	0.036(1)
C(9)	0.6453(6)	0.6218(6)	0.7432(5)	0.050(1)
C(10)	0.5869(7)	0.4906(7)	0.8948(6)	0.062(1)
C(11)	0.6305(8)	0.3280(7)	0.8874(6)	0.065(1)
C(12)	0.7298(7)	0.3002(6)	0.7263(6)	0.055(1)
C(13)	0.6195(5)	0.6882(4)	0.2662(5)	0.035(1)
C(14)	0.5018(5)	0.8634(5)	0.2615(5)	0.042(1)
C(15)	0.3481(6)	0.9006(6)	0.1732(5)	0.048(1)
C(16)	0.4295(5)	0.9453(4)	-0.0239(5)	0.039(1)
W	0.4462(6)	1.0915(4)	-0.4466(4)	0.064(1)

**Table 3. Bond lengths (Å) and angles (°) for non-hydrogen atoms of C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>O<sub>2</sub>H<sub>3</sub>CuCl<sub>2</sub>. The e.s.d.'s are in parentheses.**

Cu-N(1)	2.050(3)	N(2)-Cu-N(1)	161.2(1)	C(3)-C(4)-C(5)	119.4(4)
Cu-N(2)	2.016(3)	N(2)-Cu-N(3)	81.0(1)	C(4)-C(5)-C(6)	119.0(4)
Cu-N(3)	2.020(3)	N(3)-Cu-N(1)	80.9(1)	N(2)-C(6)-C(5)	122.3(5)
Cu-Cl(1)	2.516(1)	N(1)-Cu-Cl(2)	153.1(1)	N(1)-C(7)-C(8)	108.2(3)
Cu-Cl(2)	2.263(1)	N(2)-Cu-Cl(2)	97.5(1)	N(3)-C(8)-C(9)	122.4(4)
N(1)-C(1)	1.466(4)	N(3)-Cu-Cl(2)	96.6(1)	N(3)-C(8)-C(7)	115.1(3)
N(1)-C(7)	1.481(4)	N(1)-Cu-Cl(1)	97.8(1)	C(9)-C(8)-C(7)	122.5(3)
N(1)-C(13)	1.497(4)	N(2)-Cu-Cl(1)	92.5(1)	C(10)-C(9)-C(8)	119.0(4)
N(2)-C(2)	1.340(5)	N(3)-Cu-Cl(1)	94.5(1)	C(11)-C(10)-C(9)	119.1(4)
N(2)-C(6)	1.336(5)	Cl(2)-Cu-Cl(1)	109.2(1)	C(10)-C(11)-C(12)	119.1(4)
N(3)-C(12)	1.331(5)	C(1)-N(1)-C(7)	113.3(3)	N(3)-C(12)-C(11)	121.9(4)
N(3)-C(8)	1.340(5)	C(1)-N(1)-C(13)	111.4(3)	N(1)-C(13)-C(14)	114.7(3)
O(1)-C(16)	1.324(5)	C(7)-N(1)-C(13)	112.1(3)	C(13)-C(14)-C(15)	111.1(3)
O(2)-C(16)	1.204(5)	C(1)-N(1)-Cu	107.5(2)	C(16)-C(15)-C(14)	112.3(3)
C(1)-C(2)	1.506(6)	C(7)-N(1)-Cu	105.3(2)	O(2)-C(16)-O(1)	123.2(3)
C(2)-C(3)	1.393(5)	C(13)-N(1)-Cu	106.8(2)	O(2)-C(16)-C(15)	124.4(3)
C(3)-C(4)	1.371(7)	C(6)-N(2)-C(2)	118.8(4)	O(1)-C(16)-C(15)	112.4(3)
C(4)-C(5)	1.372(8)	C(6)-N(2)-Cu	127.4(3)		
C(5)-C(6)	1.378(7)	C(2)-N(2)-Cu	113.7(3)		
C(7)-C(8)	1.499(5)	C(12)-N(3)-C(8)	118.4(3)		
C(8)-C(9)	1.376(5)	C(12)-N(3)-Cu	128.0(3)		
C(9)-C(10)	1.374(7)	C(8)-N(3)-Cu	113.5(2)		
C(10)-C(11)	1.367(8)	N(1)-C(1)-C(2)	109.2(3)		
C(11)-C(12)	1.390(7)	N(2)-C(2)-C(3)	121.6(4)		
C(13)-C(14)	1.525(5)	N(2)-C(2)-C(1)	116.1(3)		
C(14)-C(15)	1.528(5)	C(3)-C(2)-C(1)	122.3(4)		
C(15)-C(16)	1.505(5)	C(4)-C(3)-C(2)	118.9(5)		

와 한 개의 물분자의 초기 좌표는 SHELXS-97<sup>1)</sup>를 사용한 Direct method로 결정하였으며, SHELXL-97<sup>2)</sup>을 사용하여 Full-Matrix Least-Square 방법으로 정밀화 하였다. 19개의 수소원자 위치는 기하학적으로 계산하였다.

정밀화 계산은  $\sum w(|F_o|^2 - |F_c|^2)^2$ 을 최소화 하였으며  $w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.718 \times P)^2]$ ,  $P = [\text{Max}(F_o^2, 0) + 2 \times F_c^2]/3$ 이고 변수의 개수는 234개이다. 독립 회절데이터( $N_F$ )와 파라메타수( $N_p$ )의 비는  $N_F/N_p = 7.20$ 이고, 최종 신뢰도 인자는  $F_o > 4\sigma(F_o)$ 인 1659개의 독립회절데이터에 대해  $R = 0.0247$ ,  $wR = 0.0609$ 이다. 모든 계산은 Pentium PC를 사용하였으며, data reduction 및 계산은 WinGX<sup>3)</sup>를 사용하였다. 실험에 대한 전반적인 사항은 Table 1에 정리하였고, 비 수소원자들의 좌표는 Table 2에, 분자내의 결합길이 및 결합각은 Table 3에, torsion angle은 Table 4에 표시 하였다.

### 3. 결론 및 고찰

본 실험에서 사용한 C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>O<sub>2</sub>N<sub>3</sub>CuCl<sub>2</sub>의 결정계는 Triclinic이고, 공간군은  $P1$ ,  $Z = 1$ 이며, 이에 대한 분자구조와 번호 붙임은 Fig. 1에 나타내었고, 단위포 내의 Packing을 Fig. 2에 나타내었다.

본 화합물은 1개의 카르복실기를 갖고 있으며, 이 카르복실기에 있는 두개의 탄소-산소 간 결합 길이는 각각 C(16)-O(1) : 1.324(5) Å, C(16)-O(2) : 1.204(5) Å이다.

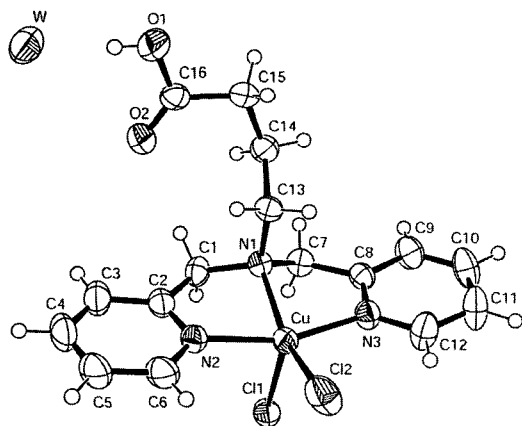
2개의 pyridine 6각고리에 있는 4개의 C-N 결합 길이는 평균 1.337(4) Å이며, pyridine 6각고리 내의 C-C 결합길이는 평균 1.378(9) Å이다.

탄소고리 C(13)-C(14)-C(15)-C(16)의 결합 길이들은 C(13)-C(14) : 1.525(5) Å, C(14)-C(15) : 1.528(5) Å, C(15)-C(16) : 1.505(5) Å 값을 갖고 있다.

N(1)을 중심에 두고 결합한 3개의 탄소의 결합

**Table 4.** Torsion angles ( $^{\circ}$ ) for non-hydrogen atoms of  $C_{16}H_{19}O_2N_3CuCl_2$ . The e.s.d.'s are in parentheses.

N(2)-Cu-N(1)-C(1)	-30.3(2)	Cu-N(2)-C(2)-C(1)	-1.5(4)
N(3)-Cu-N(1)-C(1)	154.4(2)	N(1)-C(1)-C(2)-N(2)	-24.2(4)
Cl(2)-Cu-N(1)-C(1)	-119.1(2)	N(1)-C(1)-C(2)-C(3)	157.8(3)
Cl(1)-Cu-N(1)-C(1)	61.0(2)	N(2)-C(2)-C(3)-C(4)	-1.3(6)
N(2)-Cu-N(1)-C(7)	-151.3(2)	C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	176.5(4)
N(3)-Cu-N(1)-C(7)	33.3(2)	C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	1.7(6)
Cl(2)-Cu-N(1)-C(7)	119.9(2)	C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-0.6(7)
Cl(1)-Cu-N(1)-C(7)	-60.0(2)	C(2)-N(2)-C(6)-C(5)	1.4(6)
N(2)-Cu-N(1)-C(13)	89.3(2)	Cu-N(2)-C(6)-C(5)	-174.8(3)
N(3)-Cu-N(1)-C(13)	-86.0(2)	C(4)-C(5)-C(6)-N(2)	-1.0(7)
Cl(2)-Cu-N(1)-C(13)	0.5(3)	C(1)-N(1)-C(7)-C(8)	-160.5(3)
Cl(1)-Cu-N(1)-C(13)	-179.4(2)	C(13)-N(1)-C(7)-C(8)	72.5(3)
N(3)-Cu-N(2)-C(6)	-151.1(4)	Cu-N(1)-C(7)-C(8)	-43.3(3)
N(1)-Cu-N(2)-C(6)	-165.5(3)	C(12)-N(3)-C(8)-C(9)	-1.3(6)
Cl(2)-Cu-N(2)-C(6)	-12.7(3)	Cu-N(3)-C(8)-C(9)	177.3(3)
Cl(1)-Cu-N(2)-C(6)	97.0(3)	C(12)-N(3)-C(8)-C(7)	177.7(4)
N(3)-Cu-N(2)-C(2)	32.5(5)	Cu-N(3)-C(8)-C(7)	-3.7(4)
N(1)-Cu-N(2)-C(2)	18.1(2)	N(1)-C(7)-C(8)-N(3)	32.3(4)
Cl(2)-Cu-N(2)-C(2)	170.9(2)	N(1)-C(7)-C(8)-C(9)	-148.7(3)
Cl(1)-Cu-N(2)-C(2)	-79.4(2)	N(3)-C(8)-C(9)-C(10)	0.9(6)
N(2)-Cu-N(3)-C(12)	146.7(4)	C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-178.1(4)
N(1)-Cu-N(3)-C(12)	161.1(4)	C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	0.3(7)
Cl(2)-Cu-N(3)-C(12)	8.1(4)	C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	-1.0(8)
Cl(1)-Cu-N(3)-C(12)	-101.8(4)	C(8)-N(3)-C(12)-C(11)	0.5(7)
N(2)-Cu-N(3)-C(8)	-31.8(5)	Cu-N(3)-C(12)-C(11)	-177.8(4)
N(1)-Cu-N(3)-C(8)	-17.4(2)	C(10)-C(11)-C(12)-N(3)	0.6(8)
Cl(2)-Cu-N(3)-C(8)	-170.3(2)	C(1)-N(1)-C(13)-C(14)	-75.1(4)
Cl(1)-Cu-N(3)-C(8)	79.8(2)	C(7)-N(1)-C(13)-C(14)	53.0(4)
C(7)-N(1)-C(1)-C(2)	152.6(3)	Cu-N(1)-C(13)-C(14)	167.8(2)
C(13)-N(1)-C(1)-C(2)	-80.0(3)	N(1)-C(13)-C(14)-C(15)	153.9(3)
Cu-N(1)-C(1)-C(2)	36.7(3)	C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	-75.7(4)
C(6)-N(2)-C(2)-C(3)	-0.3(5)	C(14)-C(15)-C(16)-O(2)	5.3(5)
Cu-N(2)-C(2)-C(3)	176.5(3)	C(14)-C(15)-C(16)-O(1)	-175.8(3)
C(6)-N(2)-C(2)-C(1)	-178.2(3)	Cu-N(2)-C(2)-C(1)	-1.5(4)

**Fig. 1.** Perspective view of the title compound with the atomic numbering. Ellipsoids for non-H atoms correspond to 50% probability.

길이는 N(1)-C(1) : 1.466(4) Å, N(1)-C(7) : 1.481(4) Å, N(1)-C(13) : 1.497(4) Å이다.

Cu를 중심으로 결합한 원자들의 거리는 Cu-Cl(1) : 2.516(1) Å, Cu-Cl(2) : 2.263(1) Å, Cu-N(1) : 2.050(3) Å, Cu-N(2) : 2.016(3) Å, Cu-N(3) : 2.020(3) Å이다. Cu-Cl(1)의 결합길이가 Cu-Cl(2)보다 길지만 문헌에 나와 있는 결합길이 범위의 값을 갖고 있다.<sup>4)</sup>

Cu를 중심으로 결합한 원자들의 각들은 N(2)-Cu-N(3) : 161.2(1) $^{\circ}$ , N(2)-Cu-N(1) : 81.1(1) $^{\circ}$ , N(3)-Cu-N(1) : 80.9(1) $^{\circ}$ , N(2)-Cu-Cl(2) : 97.5(1) $^{\circ}$ , N(3)-Cu-Cl(2) : 96.6(1) $^{\circ}$ , N(1)-Cu-Cl(2) : 153.1(1) $^{\circ}$ , N(2)-Cu-Cl(1) : 92.5(1) $^{\circ}$ , N(3)-Cu-Cl(1) : 94.5(1) $^{\circ}$ , N(1)-Cu-Cl(1) : 97.8(1) $^{\circ}$ 이다.

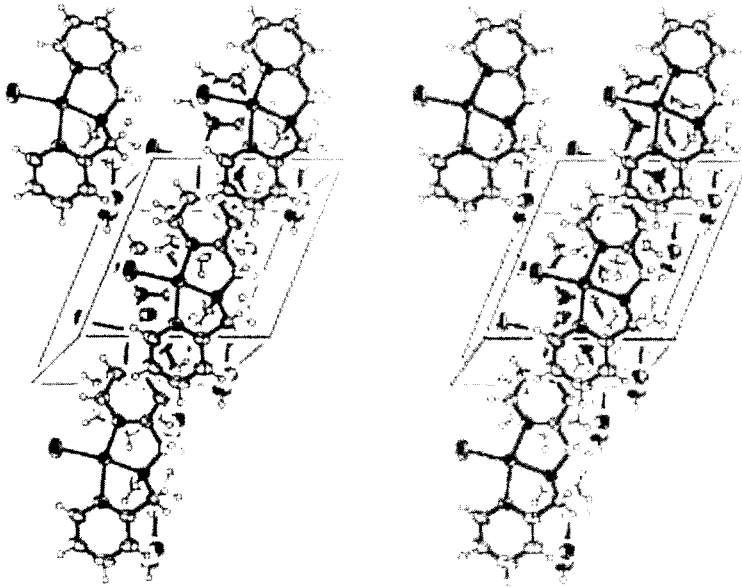


Fig. 2. A stereoscopic view of the packing for the title compound. The c-axis is vertical and a-axis horizontal.

본 구조의 N(1)을 중심으로 한 사면체를 이루고 있는 각은 C(1)-N(1)-C(13) : 111.4(3)°, C(1)-N(1)-Cu : 107.5(2)°, C(7)-N(1)-Cu : 105.3(2)°, C(13)-N(1)-Cu : 106.8(2)°, C(7)-N(1)-C(13) : 112.1(3)°, C(1)-N(1)-C(7) : 113.3(3)°으로 찌그러진 사면체를 이루고 있다.

분자 내의 N(1)-C(13)-C(14)-C(15), C(13)-C(14)-C(15)-C(16), C(14)-C(15)-C(16)-O(2), C(14)-C(15)-C(16)-O(1)의 torsion angle은 각각 153.9(3)°, -75.7(4)°, 5.3(5)°, -175.8(3)°을 이루고 있다.

분자 내에는 두개의 피리딘 6각고리 A, B가 있다. 고리 A는 -0.009(5) Å[C(4)]~-0.009(4) Å[C(6)] 사이에서 최적평면을 이루고 있으며, 평면 A로부터 C(1)은 -0.059(7) Å, Cu는 -0.133(7) Å 떨어져 있어 이 두 원자는 평면 A와 근사적으로 한 평면을 이루고 있다. 고리 B는 -0.006(5) Å[C(10)]~0.008(5) Å[C(11)] 사이에서 최적평면을 이루고 있으며, 평면 B로부터 C(7)은 0.052(7) Å, Cu는 -0.073(6) Å 떨어져 있어 이 두 원자도 평면 B와 근사적으로 한 평면을 이루고 있다. 평면 A와 평면 B가 이루는 이면각은 171.9(2)°이다.

전체적인 분자의 모양은 Cl(1)과 Cl(2)를 머리로 하고 고리 A, B를 두 날개로, 탄소 고리를 꼬리로 하여 날아가는 새와 같은 모양을 하고 있다.

본 구조내의 비 수소원자들의 등가 온도인자는 0.031(1)~0.065(1)으로써 양호한 값을 갖고 있으며, 분자 간 가장 가까운 Intermolecular contact는 O(2)... C(12) (x, y + 1, z - 1) : 3.138(6) Å으로 분자와 분자사이는 van der Waals 힘으로 결합하고 있다.

## 참고문헌

- 1) Sheldrick, G. M., "SHELXS-97", Program for the solution of crystal structures, Univ. of Gottingen, Germany (1997).
- 2) Sheldrick, G. M., "SHELXL-97", Program for the refinement of crystal structures, Univ. of Gottingen, Germany (1997).
- 3) Farrugia, L. J., *J. Appl. Cryst.*, **32**, 837 (1999).
- 4) International Tables For X-Ray Crystallography, Vol. III, Kynoch Press Birmingham, England, 260 (1986).