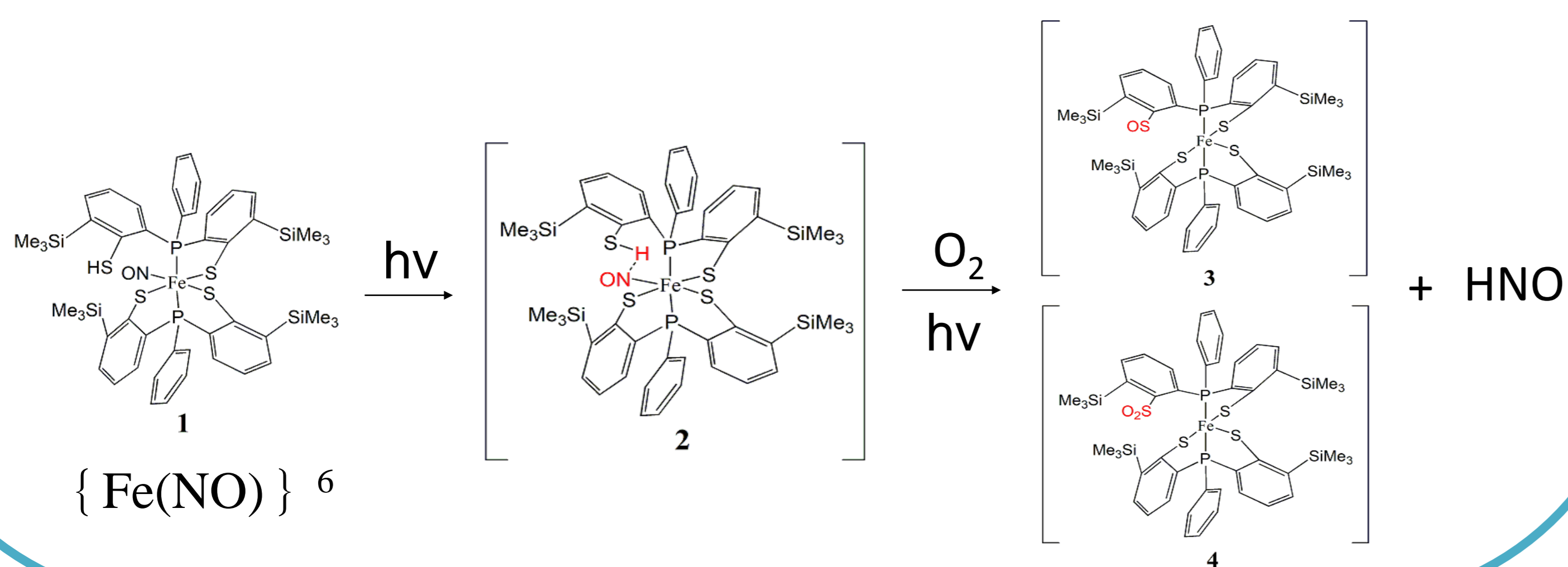


## Abstract

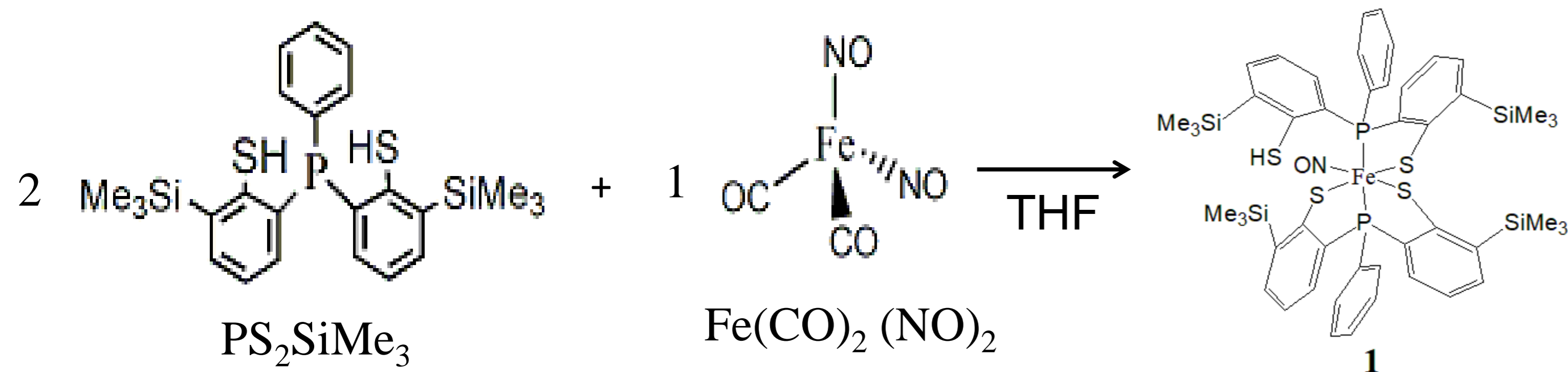
本實驗室合成的 $\text{Fe}(\text{NO})(\text{P}(\text{Ph})(\text{C}_6\text{H}_3-2-\text{S}-3-\text{SiMe}_3)_2)(\text{P}(\text{Ph})(\text{C}_6\text{H}_3-2-\text{SH}-3-\text{SiMe}_3)(\text{C}_6\text{H}_3-2-\text{S}-3-\text{SiMe}_3))$ (**1**)錯合物具有未配位的硫醇基。依據Enemark-Feltham所提出的表示法，錯合物**1**為 $\{\text{Fe}(\text{NO})\}^6$ ，並對其做IR、UV-Vis、 $^1\text{H}$  NMR和X-ray單晶繞射的鑑定。

錯合物**1**可以經由照光(60W鎢絲燈或者一般日光燈)後會產生 $\text{HNO}$ ，並且藉由IR和NMR來去推測其照光後的中間體(**2**)。我們推測**1**錯合物照光後會產生結構上的改變，使得S-H上的H會和Fe-NO的N產生交互作用，也推測接觸氧氣後會氧化錯合物**1**的S而形成 $\text{SO}$ (**3**)或 $\text{SO}_2$ (**4**)並且釋放出 $\text{HNO}$ 。

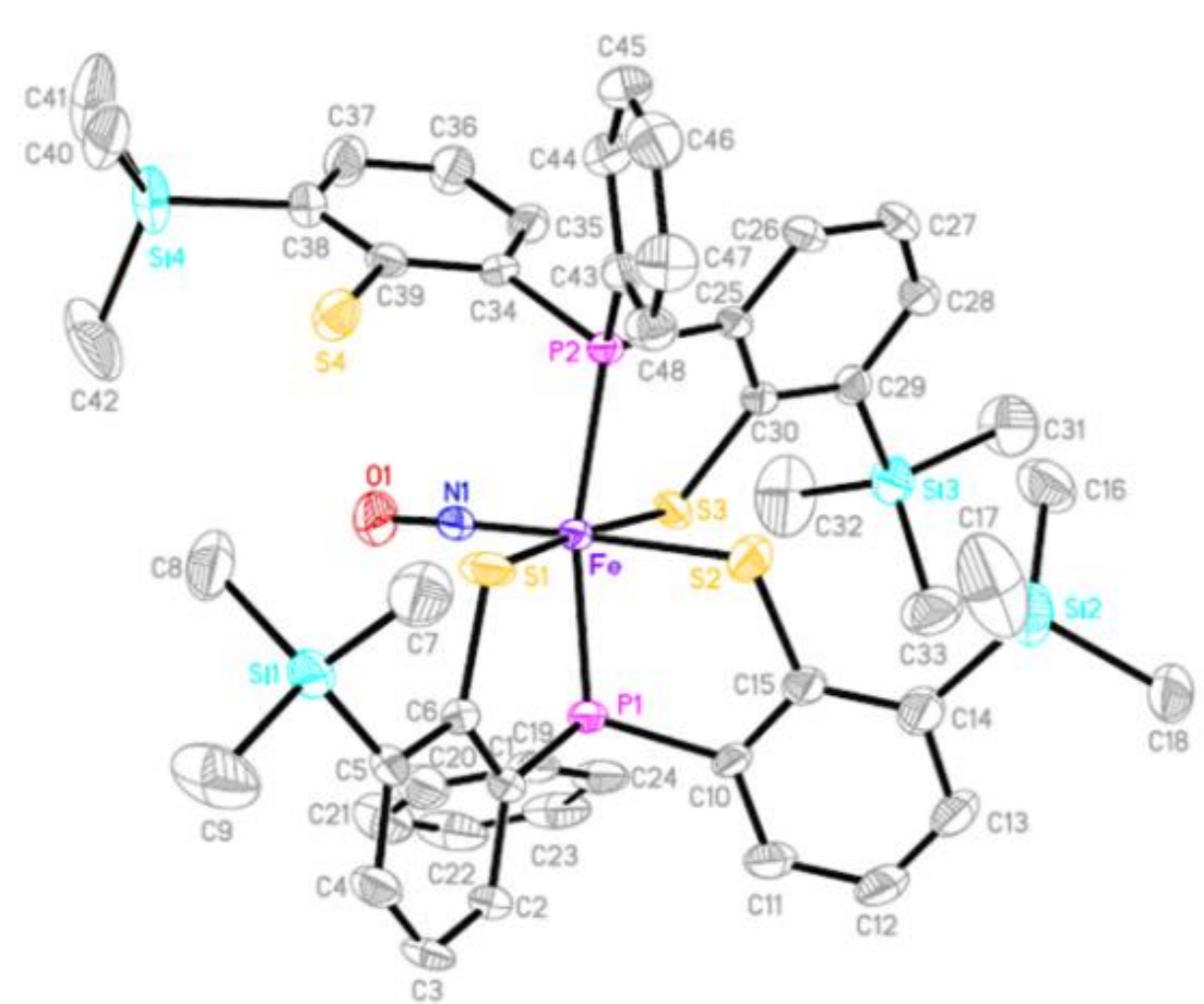


## Experiment and Result

### 錯合物**1**的合成



### 錯合物**1**的結構與光譜分析



Fe和相鄰元素鍵長[Å]	和鍵角[°]
N(1)-O(1)	1.145(4)
Fe-N(1)	1.646(3)
N(1)-Fe-S(2)	177.72(11)
O(1)-N(1)-Fe	177.2(3)

Figure 1 錯合物**1**之X-ray晶體結構圖

### 錯合物的**1**照光反應

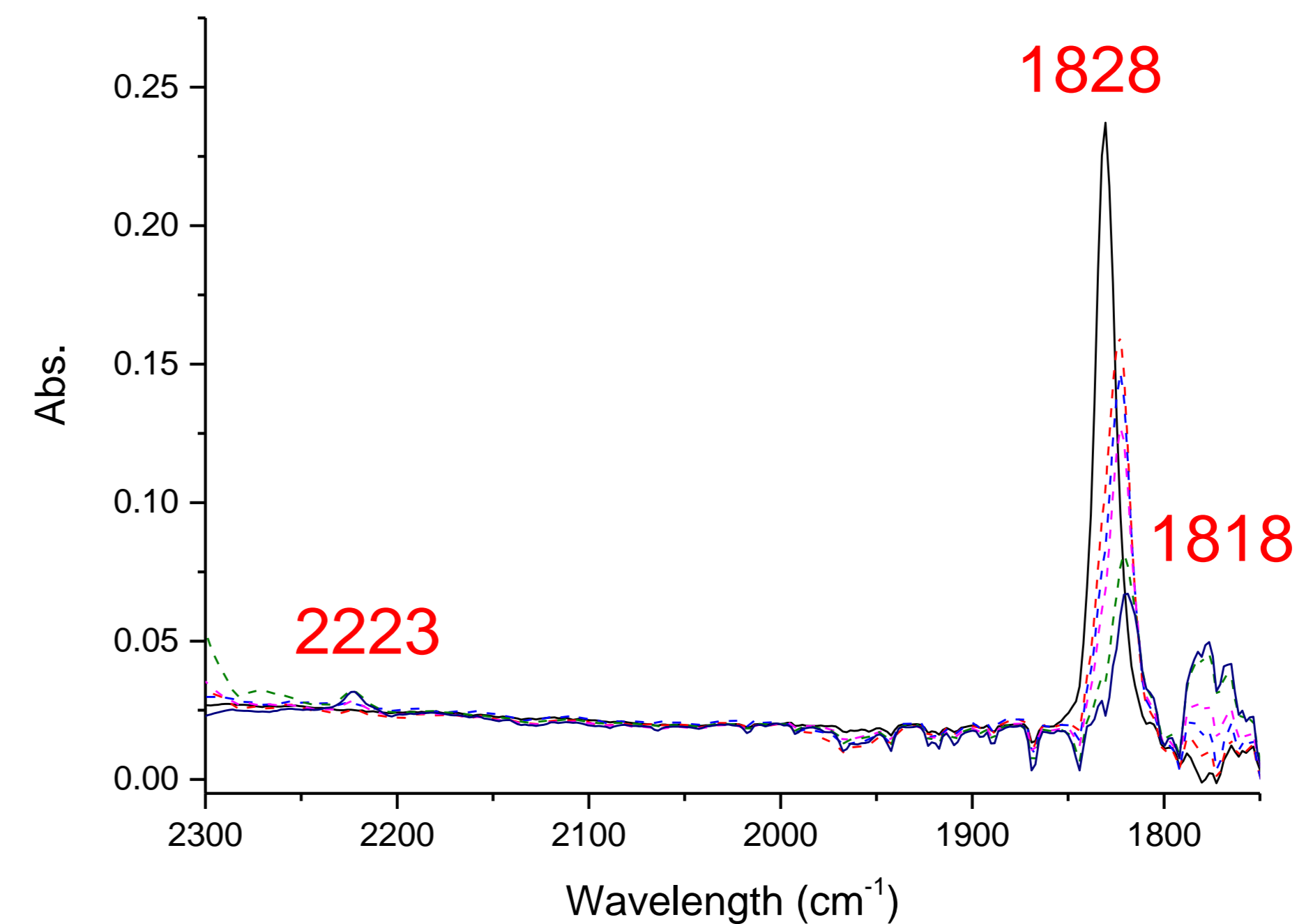


Figure 4 錯合物**1**之照光變化IR光譜圖(THF)

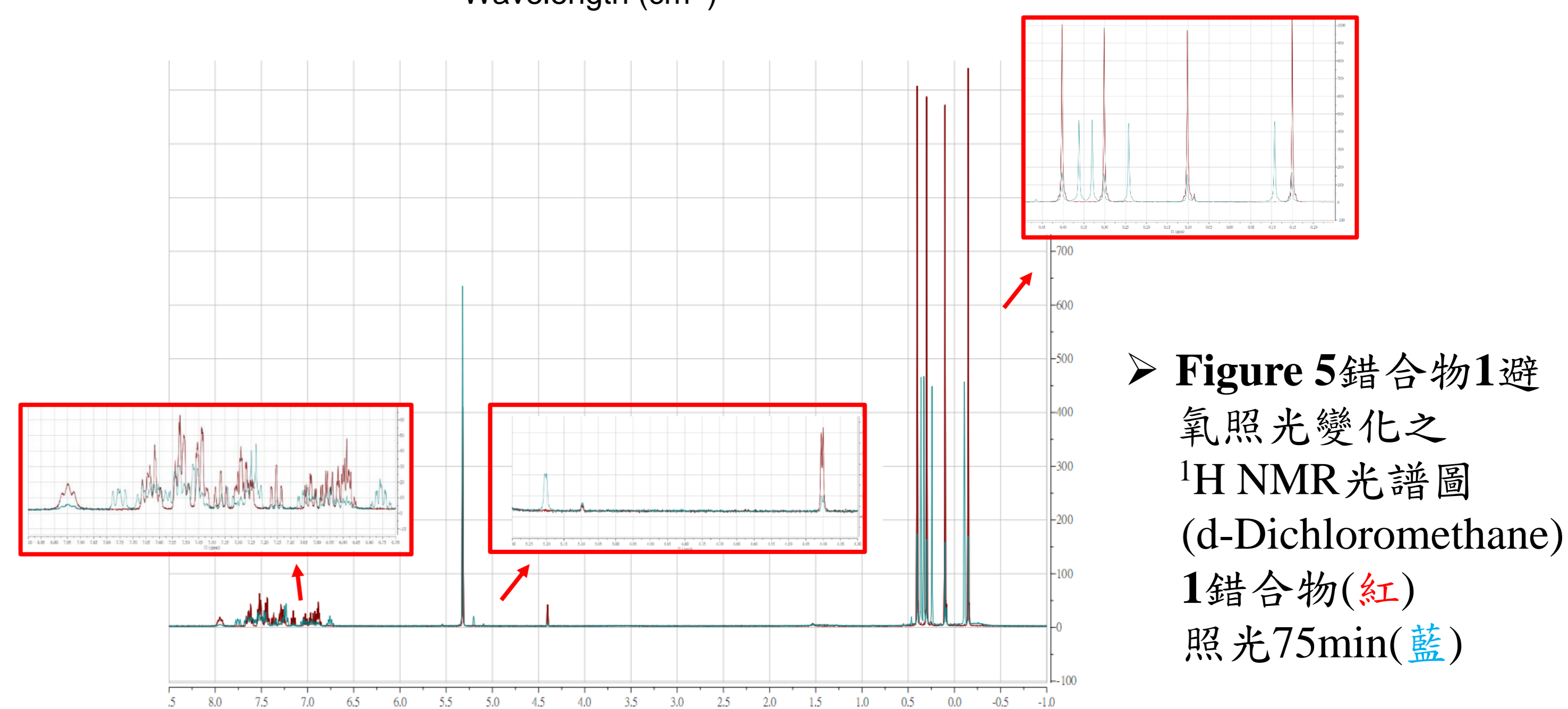


Figure 5 錯合物**1**避氧照光變化之 $^1\text{H}$  NMR光譜圖(d-Dichloromethane)  
**1**錯合物(紅) 照光75min(藍)

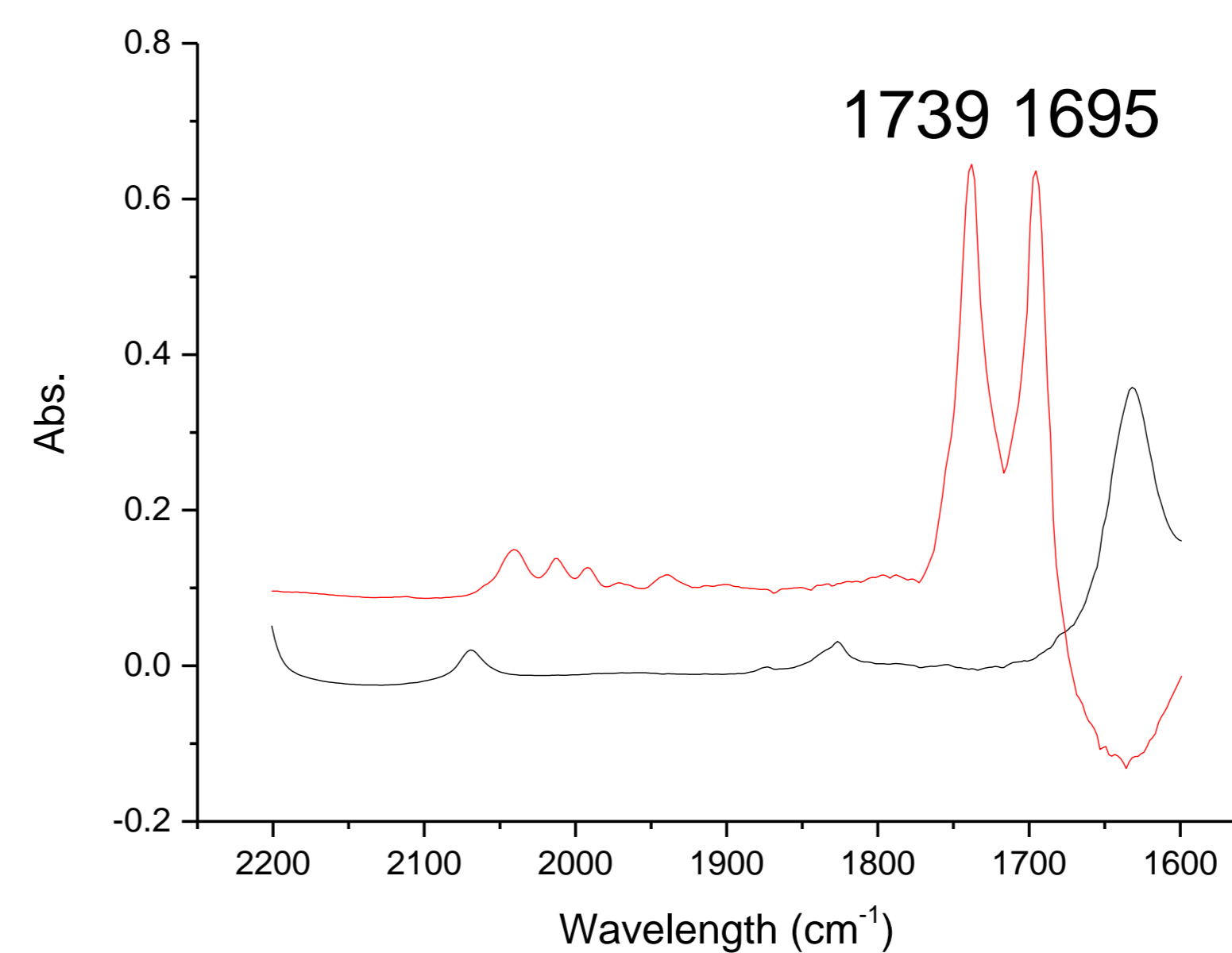
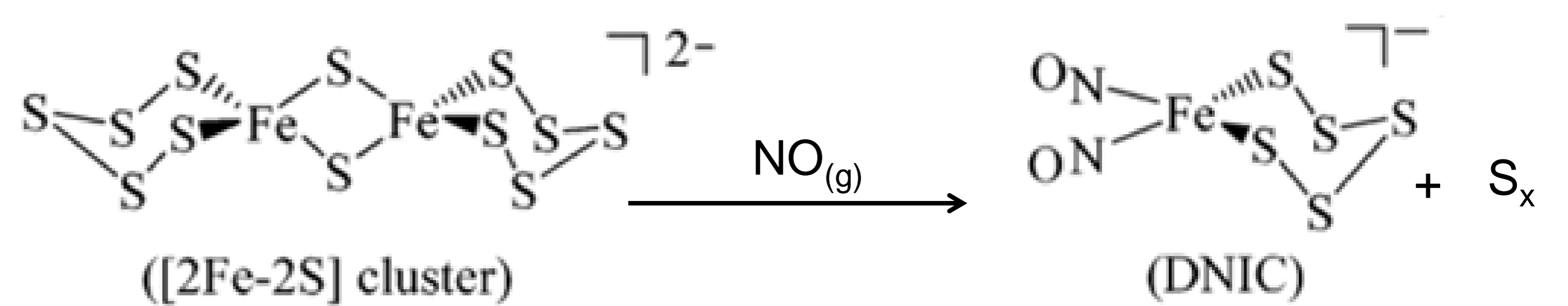


Figure 6 錯合物**1**經1小時照光所釋放出的氣體通入[2Fe-2S] cluster之IR光譜圖(THF)

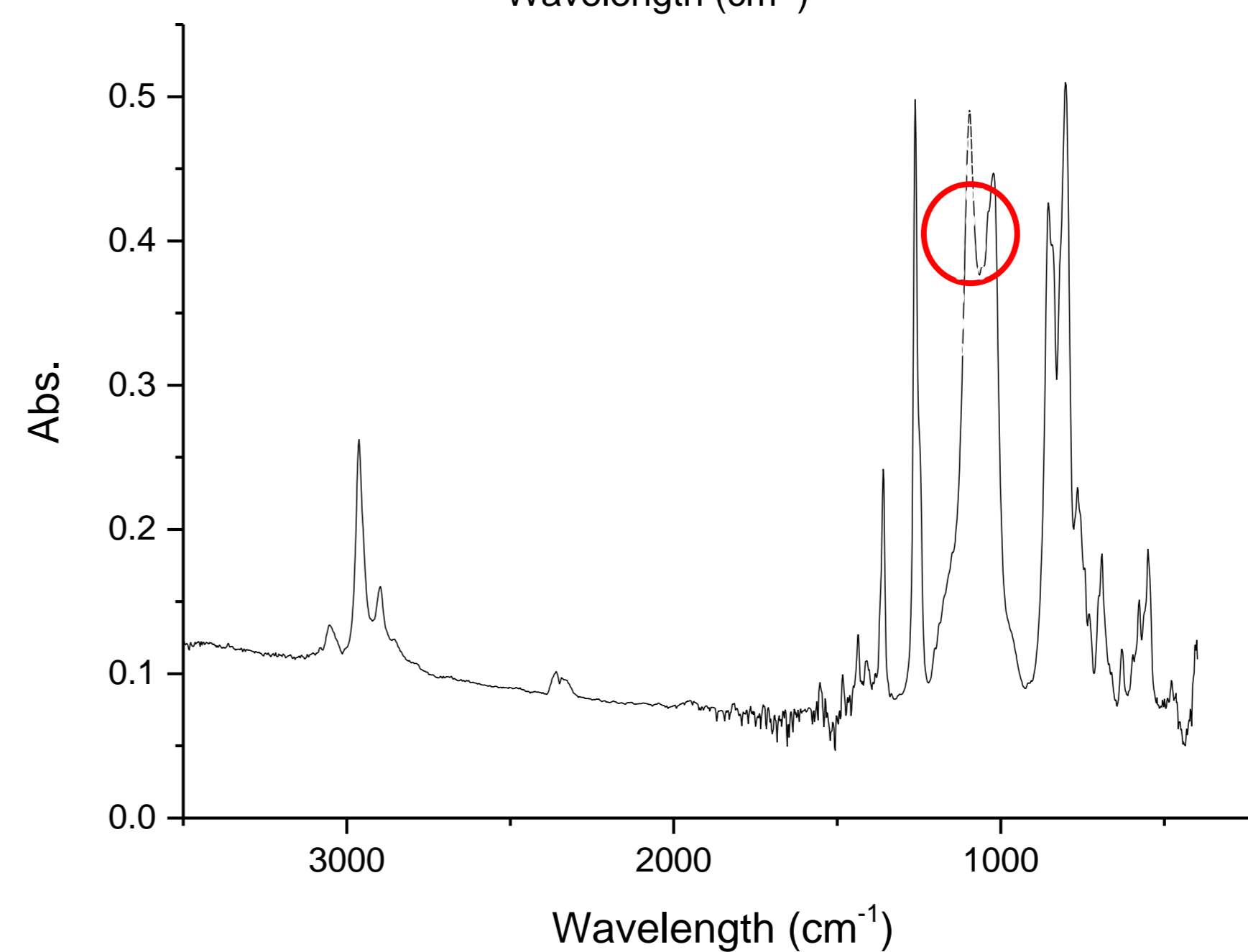


Figure 7 錯合物**1**照光後的綠色固體之IR光譜圖(KBr)

## Conclusion

本實驗室合成出 $\text{Fe}-\text{NO}$ 錯合物(**1**)，此錯合物用一般日光燈即可釋放出 $\text{HNO}$ 可由IR( $\nu_{\text{NO}}$ )吸收峰 $2223\text{cm}^{-1}$ (THF)( $2\text{HNO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$ )和[2Fe-2S] cluster 證實。

藉由IR和NMR來去推測其照光後的中間體(**2**)。我們推測錯合物**1**照光後會產生結構上的改變，使得硫醇可能靠近金屬而導致S-H上的H會和Fe-NO的N產生較弱的氫鍵。我們進一步的推測通入氧氣後再照光會使三重態的氧變為具有活性的單重態氧，而使錯合物**1**的S氧化形成 $\text{SO}$ (**3**)或 $\text{SO}_2$ (**4**)並且釋放出 $\text{HNO}$ 。

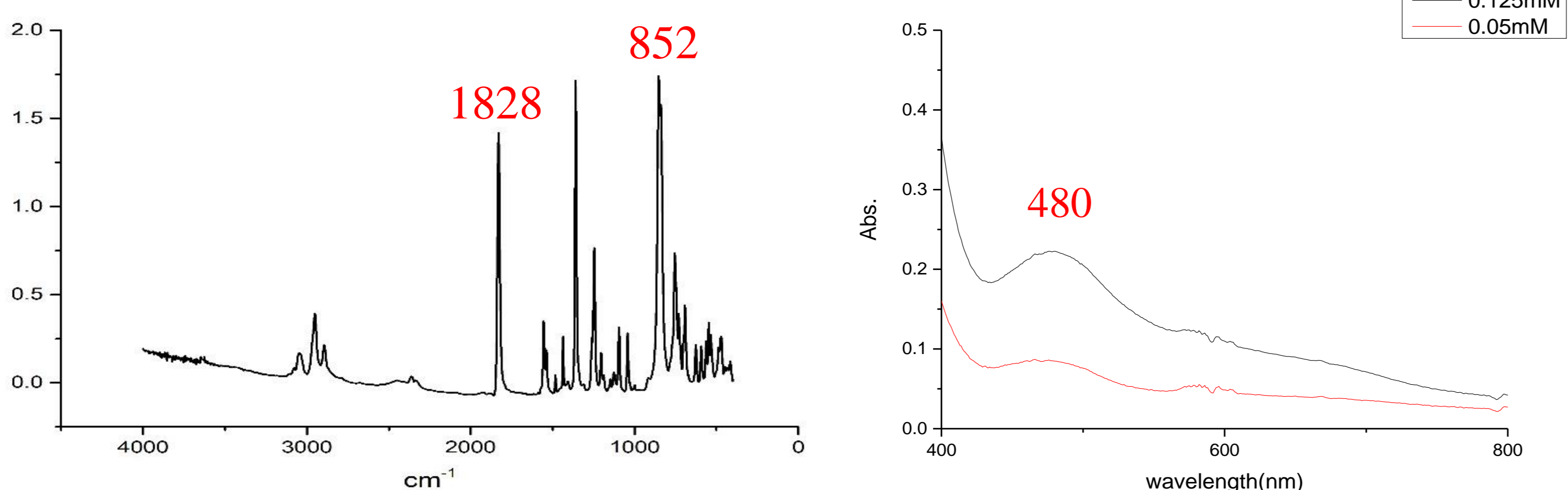


Figure 2 錯合物**1**之UV-Vis光譜圖(DCM) Figure 3 錯合物**1**之IR光譜圖(KBr)  
Absorption spectrum( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )  
[ $\lambda_{\text{max}}$ , nm( $\epsilon$ ,  $\text{M}^{-1}\text{cm}^{-1}$ ):(480)(1742)]