

[(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>4</sub>N]<sub>2</sub>{Fe<sub>4</sub>S<sub>4</sub>[S<sub>2</sub>CN(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]<sub>4</sub>}的晶体和分子结构

杨光第,孙宏林,徐吉庆,千吉松,魏谄

吉林大学理论化学研究所;吉林大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** [(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>4</sub>N]<sub>2</sub>{Fe<sub>4</sub>S<sub>4</sub>[S<sub>2</sub>CN(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]<sub>4</sub>}单晶样品在Nicolet-R3四圆衍射仪上收集X射线衍射数据. 分析结果给出其晶胞参数: a=22.125(6), b=11.313(3), c=25.053 Å; β=118.05(2)°; V=5534.19 Å<sup>3</sup>, Z=4, 空间群Cc. 衍射数据经过L<sub>p</sub>因子和经验吸收效应校正. 分子中铁原子的位置从三维Patterson图上得到. 接着经过若干轮Fourier和差Fourier电子云密度合成, 发现全部其余非氢原子的坐标. 氢原子位置根据理论模型计算. 结构修正最后收敛至R=0.073, R<sub>w</sub>=0.069. 标题化合物是由[(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>4</sub>N]<sup>+</sup>和{Fe<sub>4</sub>S<sub>4</sub>[S<sub>2</sub>CN(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]<sup>2-</sup>组成的离子型化合物. 结构的主要特点表现在阴离子上, 而在阴离子中含有类立方烷型簇核Fe<sub>4</sub>S<sub>4</sub>. 该簇核中每个铁原子与五个硫原子配位, 其配位多面体构型均为畸变的四方锥.

**关键词** [晶体结构测定](#) [叔胺](#) [分子结构](#) [X射线衍射分析](#) [计算机应用](#) [铁络合物](#) [固氮酶](#) [簇状化合物](#) [二乙胺 P](#) [硫络合物](#) [四乙铵化合物](#) [四面体配位](#)

分类号 [074](#) [0611.662](#)

**Crystal and molecular structure of [(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>4</sub>N]<sub>2</sub>{Fe<sub>4</sub>S<sub>4</sub>[S<sub>2</sub>CN(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>]<sub>4</sub>}**

YANG GUANGDI, SUN HONGLIN, XU JIQING, QIAN JISONG, WEI QUAN

**Abstract** The title compound belongs to space group Cc with a 22.125(6), b 11.313(3), c 25.053(8) Å and β 118.05(2)°. The structure was refined to R = 0.073 and R<sub>w</sub> = 0.069 for 1934 reflections. The structure contains Fe<sub>4</sub>S<sub>4</sub> clusters with cubane-like configurations. Each Fe atom in the cluster is coordinated with 5 S atoms which are located on the vertexes of a distorted square pyramid. The atomic parameters are given.

**Key words** [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [TERTIARY AMINE](#) [MOLECULAR STRUCTURE](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [COMPUTER APPLICATIONS](#) [IRON COMPLEX](#) [NITROGENASE](#) [CLUSTER COMPOUND](#) [DIETHYLAMINE P](#) [SULFIDE COMPLEX](#) [TETRAETHYLAMMONIUM](#) [COMPOUNDS](#) [TETRAHEDRAL COORDINATION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(365KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“晶体结构测定” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [杨光第](#)
- [孙宏林](#)
- [徐吉庆](#)
- [千吉松](#)
- [魏谄](#)