

复合阴离子稀土穴醚配合物的分子和晶体结构研究

李月军,朱其秀,许振华,徐光宪,韩玉真,马生

北京大学化学系;北京大学物理化学研究所;中国地质大学

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 首次合成了稀土元素镱的异硫氰酸、硝酸复合阴离子穴醚(2,2,2)配合物 $\text{H}_2\text{Yb}(\text{NCS})\sim 3(\text{NO}_3)\sim 2\cdot\text{H}_2\text{O}$.

(2,2,2)。测定了它的晶体结构及红外光谱,发现 Yb^{3+} 没有进入穴醚空穴,

它通过 H_2O 桥以氢键与穴醚的O原子结合。经研究认为,分子中2个 H^+ 结合在穴醚中2

个N原子上。与 Yb^{3+} 配位的异硫氰酸根、硝酸根及分子形成八配位的三角十二面几何构型。晶体属单斜晶系,空间群: $\text{P}2_1/\text{n}$ 。

关键词 [晶体结构测定](#) [红外分光光度法](#) [镱络合物](#) [异硫氰酸](#) [硝酸盐](#) [P](#) [穴醚配合物](#)

分类号 [0627](#) [0611.662](#)

Crystal and molecular structure of a cryptate $\text{H}_2\text{Yb}(\text{NCS})\sim 3(\text{NO}_3)\sim 2\cdot\text{H}_2\text{O}.$ (2,2,2)

LI YUEJUN,ZHU QIXIU,XU ZHENHUA,XU GUANGXIAN,HAN YUZHEN,MA

Abstract The title compound is monoclinic, space group $\text{P}2_1/\text{n}$, with a 1.2254(4), b 2.638(1), c 1.0735(3) nm, and b 98.82(2)? Z = 4. The atomic coordinates are given. The structure was solved by direct methods and refined by least-squares to R = 0.053. The IR spectra are described. The Yb^{3+} ion is not in the cryptand cavity but is connected to it through a H_2O bridge by 2 H bonds. The 2 H^+ are bound to the 2 N atoms of the cryptand. The Yb^{3+} is in dodecahedral coordination with the NO_3^- , NCS^- , and H_2O . The bond lengths and angles are given.

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [YTTERBIUM COMPLEX](#) [ISOTHIOCYANIC ACID](#) [NITRATE](#) [P](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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

- [李月军](#)
- [朱其秀](#)
- [许振华](#)
- [徐光宪](#)
- [韩玉真](#)
- [马生](#)