

[Ni(CHZ)₃]SO₄·3H₂O的合成、晶体结构及热分解特性

张进; 张同来; 杨利; 张建国; 崔燕

北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081

摘要:

用硫酸镍与碳酰肼(CHZ)反应, 制备得到一种新型含能配合物[Ni(CHZ)₃]SO₄·3H₂O, 通过X射线单晶衍射, 元素分析和傅立叶变换红外(FTIR)光谱对其进行了表征. 晶体结构测试表明, 该化合物晶体属于三斜晶系, P1空间群, a=0.85237(1) nm, b=0.90964(1) nm, c=1.22559(2) nm, β=96.731(2)°, V=0.8849(2) nm³, Z=2, D_c=1.798 g·cm⁻³. 在该配合物分子中, 碳酰肼作为双齿配体, 以羰基O原子和端基N原子与Ni²⁺离子发生配位, 形成3个相互垂直的五元平面螯合环. 在氢键、静电引力和范德华力的作用下, 该配合物形成了复杂的三维网状结构. 对碳酰肼分子进行了DFT-B3LYP/6-311+G**量化计算研究, 得到其NBO电荷, 从理论上说明碳酰肼的配位点是羰基O原子和端基N原子. 采用DSC、TG-DTG和FTIR光谱技术对目标化合物的热分解机理进行了研究, 并用Kissinger法和Ozawa-Doyle法对其热分解过程中两个放热峰的非等温反应动力学参数进行了计算. 结果表明, 该配合物具有较高的能量和良好的热稳定性.

关键词: 镍(II)配合物 碳酰肼 晶体结构 热分解

收稿日期 2007-12-17 修回日期 2008-01-14 网络版发布日期 2008-03-13

通讯作者: 张同来 Email: ztlbit@bit.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(865KB\)](#)

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](#)
- [引用本文](#)
- [Email Alert](#)
- [文章反馈](#)
- [浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

- ▶ [镍\(II\)配合物](#)
- ▶ [碳酰肼](#)
- ▶ [晶体结构](#)
- ▶ [热分解](#)

本文作者相关文章

- ▶ [张进](#)
- ▶ [张同来](#)
- ▶ [杨利](#)
- ▶ [张建国](#)
- ▶ [崔燕](#)