

单、双核镍(II)配合物的晶体结构、光谱和磁性

阎世平,张雷,阎洪亮,廖代正,姜宗慧,王耕霖,王宏根,姚心侃

南开大学化学系,天津(300071);南开大学测试计算中心,天津(300071)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 报道2个具有三足四齿配体,三(2-甲基吡啶)胺(缩写TPA)的单、双核镍(II)配合物。X射线晶体结构分析结果表明,双核镍配合物(1)晶体(C₃~6H~3~6N~8Ni~2Cl~2).11/6(ClO~4).1/6(OH).8/6(H~2O)属三方晶系,空间群为R-3,a=2.8425(4)nm,b=2.8425(4)nm,c=1.4385(5)nm,α=β=90.00iii,γ=120.00iii,Z=18,最终因子R=0.078,Rw=0.078。单核配合物晶体C~2~0H~1~8N~6NiS~2.0.5(H~2O),属三斜晶系,空间群P1,a=0.9467(1)nm,b=1.5566(3)nm,c=1.5913(3)nm,α=73.59(4)iii,β=87.37(3)iii,γ=76.27(2)iii,Z=4,最终因子R=0.0784,Rw=0.238。双核配合物的变温磁化率(4-300K)数据表明,用最小二乘法进行理论拟合(H=-2JS~1.S~2),得出交换积分J=6.72cm⁻¹,θ=-0.60cm⁻¹,表明双核镍之间为弱的铁磁相互作用,分子间为弱的反铁磁相互作用。

关键词 [镍络合物](#) [双核络合物](#) [晶体结构](#) [磁性](#) [吡啶胺P](#) [X射线衍射分析](#)

分类号 [0611.662](#)

Crystal structure, spectra and magnetism of mono-, di-nickel(II) complexes

Yan Shiping,Zhang Lei,Yan Hongliang,Liao Daizheng,Jiang Zonghui,Wang Genglin,Wang Honggen,Yao Xinkan

Nankai Univ, Dept Chem.Tianjin(300071);Nankai Univ., Center of Testing and Computer.Tianjin(300071)

Abstract Two complexes, one is binuclear Ni(II) complex 1, another is mononuclear Ni(II) complex 2 with the ligand TPA [TPA=tri(2- pyridylmethyl) amide], have been synthesized. Their structures have determined by single crystal X-ray diffraction method. The binuclear Ni(II) complex, C₃~6H~3~6N~8Ni~2Cl~2).11/6(ClO~4).1/6(OH).8/6(H~2O), is trigonal system, space group R-3, a=2.8425(4)nm, b=2.8425(4)nm, c=1.4385(5)nm, α=β=90.00iii, γ=120.00iii, Z=18, final R=0.078, Rw=0.078. The crystal of mononuclear Ni(II) complex, C~2~0H~1~8N~6NiS~2.0.5(H~2O) is triclinic system, space group, P1, a=0.9467(1)nm, b=1.5566(3)nm, c=1.5913(3)nm, α=73.59(4)iii, β=87.37(3)iii, γ=76.27(2)iii, Z=4, R=0.0784, Rw=0.238. The variable temperature magnetic susceptibility (4-300K) of complex 1 indicates there is a ferromagnetic intramolecular interaction (J=6.72cm⁻¹) and weak antiferromagnetic intermolecular interaction (θ = -0.60cm⁻¹).

Key words [NICKEL COMPLEX](#) [DINUCLEAR COMPLEX](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [MAGNETISM](#) [PYRIDINAMINE P](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(519KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“镍络合物”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [阎世平](#)
- [张雷](#)
- [阎洪亮](#)
- [廖代正](#)
- [姜宗慧](#)
- [王耕霖](#)
- [王宏根](#)
- [姚心侃](#)