

研究论文

(H₂teta)₂{[Ni(teta)][Fe(CN)₆]₂}•17H₂O (teta = 5,7,7,12,14,14-Hexa-methyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane)
超分子化合物的合成、晶体结构和磁性研究

袁爱华^{*1}, 沈小平², 周虎¹, 陆路德³

¹江苏科技大学材料科学与工程学院 镇江 212003)

²江苏大学化学化工学院 镇江 212013)

³南京理工大学材料化学实验室 南京 210094)

收稿日期 2005-2-18 修回日期 2005-6-8 网络版发布日期 接受日期

摘要 将Ni(teta)(ClO₄)₂ (teta = 5,7,7,12,14,14-hexamethyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane)的DMF溶液和K₃[Fe(CN)₆]的水溶液在填充了琼脂冻胶的U型管中通过扩散反应,得到了标题化合物(H₂teta)₂{[Ni(teta)][Fe(CN)₆]₂}•17H₂O,该化合物晶体属三斜晶系,空间群P $\bar{1}$,晶胞参数为 $a=0.9998(2)$ nm, $b=1.5514(3)$ nm, $c=1.6647(4)$ nm, $\alpha=114.15(2)^\circ$, $\beta=100.91(2)^\circ$, $\gamma=93.42(2)^\circ$, $V=2.2863(10)$ nm³, $z=1$, $D_c=1.196$ g•cm⁻³, $F(000)=890$, $\mu=5.84$ cm⁻¹, $GOF=0.894$, $R_1=0.0582$, $wR_2=0.1446$ [$I>2\sigma(I)$]. 该化合物的基本单元由2个[H₂teta]²⁺阳离子、1个{[Ni(teta)][Fe(CN)₆]₂}⁴⁻阴离子和17个水分子组成,它们之间通过N—H...N氢键而形成具有二维平面结构的超分子化合物. 1.8~300 K变温磁化率研究表明,化合物中三核体系Fe ($s=1/2$)-Ni ($s=1$)-Fe ($s=1/2$)中心原子间通过氰基桥联而发生强的铁磁相互作用,磁参数 $J=4.33$ cm⁻¹, $g=2.6$, $\theta=60$ K. 通过TG-DTG测定了配合物的热稳定性.

关键词 [\[Ni\(teta\)\]²⁺](#) [氰基桥联](#) [超分子化合物](#) [晶体结构](#) [磁性质](#)

分类号

Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Property of a Supramolecule (H₂teta)₂{[Ni(teta)][Fe(CN)₆]₂}•17H₂O (teta = 5,7,7,12,14,14-Hexamethyl-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecan

YUAN Ai-Hua^{*1}, SHEN Xiao-Ping², ZHOU Hu¹, LU Lu-De³

¹ School of Material Science and Engineering, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang 212003)

² School of Chemistry and Chemical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013)

³ Material Chemistry Laboratory, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094)

Abstract The title compound (H₂teta)₂{[Ni(teta)][Fe(CN)₆]₂}•17H₂O was obtained by slow diffusion of an aqueous solution of K₃[Fe(CN)₆] and a DMF solution of [Ni(teta)(ClO₄)₂] through a U-tube containing agar at room temperature. The compound crystallizes in the triclinic space group P $\bar{1}$ with $a=0.9998(2)$ nm, $b=1.5514(3)$ nm, $c=1.6647(4)$ nm, $\alpha=114.15(2)^\circ$, $\beta=100.91(2)^\circ$, $\gamma=93.42(2)^\circ$, $V=2.2863(10)$ nm³, $z=1$, $D_c=1.196$ g•cm⁻³, $F(000)=890$, $\mu=5.84$ cm⁻¹, $GOF=0.894$, $R_1=0.0582$, $wR_2=0.1446$ [$I>2\sigma(I)$]. Its structure consists of two cations of [H₂teta]²⁺, one trinuclear anion of {[Ni(teta)][Fe(CN)₆]₂}⁴⁻ and seventeen water molecules, which are held together by the N—H...N hydrogen bonds to form a two-dimensional supramolecule. The variable temperature magnetic susceptibility, measured in the 1.8~300 K range, indicates the presence of a strong ferromagnetic interaction through the cyanide bridge in trinuclear system Fe ($s=1/2$)-Ni ($s=1$)-Fe ($s=1/2$) with magnetic parameters $J=4.33$ cm⁻¹, $g=2.6$, $\theta=60$ K. The thermal stability of the complex was studied by TG-DTG.

Key words [\[Ni\(teta\)\]²⁺](#) [cyano-bridged](#) [supramolecule](#) [crystal structure](#) [magnetic property](#)

DOI:

通讯作者 袁爱华 aihuayuan@163.com

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 [“\[Ni\(teta\)\]²⁺”](#) 的 相关文章

▶ 本文作者相关文章

· [袁爱华](#)

·

· [沈小平](#)

· [周虎](#)

· [陆路德](#)