

[Ni(PMBPTSC)(H2PMBPTSC)]·C2H5OH·2H2O的合成、结构和非等温热分解动力学

梁凯,贾殿赠,卜为名,唐新村

新疆大学应用化学研究所;吉林大学超分子与谱学国家教委开放实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 报道了标题配合物[Ni(PMBPTSC)(H2PMBPTSC)]·C2H5OH·2H2O的制备,晶体结构及非等温热分解动力学,该晶体属单斜晶系,空间群Pn, a=1.0376(3)nm, b=1.1522(3)nm, c=1.7591(3)nm; $\beta=90.75(2)^\circ$; $V=2.1028(8)\text{nm}^3$; $Z=2$, $D_c=1.329\text{g}/\text{cm}^3$; $\mu=0.614\text{mm}^{-1}$; $F(000)=880$. 根据TG-DTG曲线,运用Achar法与Coats-Redfer法对配合物第一步热分解反应进行了非等温热分解动力学研究,其机理为三维扩散机理,动力学方程为 $da/dt=Ae^{-E/RT}3/2(1-\alpha)^{2/3}[1-(1-\alpha)^{1/3}]^{-1}$,动力学补偿效应表达式为 $\ln A=0.307915E-1.20469$.

关键词 [非等温热分解动力学](#) [晶体结构](#) [镍络合物](#) [\$\beta\$ -双酮类](#) [吡啶啉P](#) [吡唑酮P](#) [热动力学](#) [分子结构](#) [热分解](#)

分类号 [0611.662](#) [0643](#)

Synthesis structure and non-isothermal kinetics of thermal decomposition of [Ni(PMBPTSC)(H2PMBPTSC)]·C2H5OH·2H2O

Liang Kai, Jia Dianzeng, Bu Weiming, Tang Xincun

Abstract Preparation, crystal structure and non-isothermal kinetics of thermal decomposition of the title Ni(II) complex [Ni(PMBPTSC)(H2PMBPTSC)]·C2H5OH·2H2O [H2PMBPTSC=(1-phenyl-3-methyl-4-benzoyl-5-pyrazolone)thiosemicarbazone] are reported. The complex belongs to monoclinic system, space group Pn, with cell parameters a=1.0376(3) nm, b=1.1522(3) nm, c=1.7591(3) nm; $\beta=90.75(2)^\circ$; $V=2.1028(8)\text{nm}^3$; $Z=2$, $D_c=1.329\text{g}/\text{cm}^3$; $\mu=0.614\text{mm}^{-1}$; $F(000)=880$. The kinetics of the first step thermal decomposition was studied under non-isothermal condition from TG-DTG curves by means of Achar and Coats-Redfer methods. The results show that this reaction is three-dimensional diffusion controlled, the kinetic equation is expressed by $da/dt=Ae^{-E/RT}3/2(1-\alpha)^{2/3}[1-(1-\alpha)^{1/3}]^{-1}$ and the kinetic compensation effect expression is $\ln A=0.307915E-1.20469$.

Key words [CRYSTAL STRUCTURE](#) [NICKEL COMPLEX](#) [\$\beta\$ -DIKETONES](#) [PYRAZOLINE P](#) [PYRAZOLONE P](#) [THERMODYNAMICS](#) [MOLECULAR STRUCTURE](#) [THERMAL DECOMPOSITION](#)

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 “非等温热分解动力学” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [梁凯](#)
- [贾殿赠](#)
- [卜为名](#)
- [唐新村](#)