

二核Fe/S化合物(Et₄N)₂[Fe₂S₂Br₄]的合成与结构

邓玉恒,温庭斌,朱红平,陈昌能,刘秋田

中国科学院福建物质结构研究所.福州(350002);中国科学院结构化学国家重点 实验室.福州(350002)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 标题化合物(Et₄N)₂[Fe₂S₂Br₄](1)在VS/FeBr₂/imnt₂/Et₄NCl反应体系中获得,它属于单斜晶系,空间群P2₁/n,主要晶胞参数为: $\alpha=0.91193(2)\text{nm}$, $b=1.0837(3)\text{nm}$, $c=1.54360(1)\text{nm}$, $\beta=105.090(1)$, $v=1.4177(5)$

nm^3 , $z=2$, $\rho=1.778\text{g}/\text{cm}^3$, $\mu=6.841\text{cm}^{-1}$, $F(000)=748$,结构精修结果为: $R_1=0.0287$, $wR_2=0.0640$ 。簇阴离子[Fe₂S₂Br₄]₂含有一个菱形Fe₂S₂单元,铁的配位几何构型明显偏离了理想的T_d对称性,导致整个阴离子的对称性降低为D_{2h}。同时观察到它的Fe--Br键呈现反常加长倾向。

关键词 [铁络合物](#) [硫化物](#) [晶体结构](#) [溴化合物](#) [季胺](#) [铁硫蛋白](#)

分类号 [0621](#)

Crystal Srtucture of tetraethylammonium di- μ_2 -sulfido-bis [dibromoiron(III)]

Deng Yuheng,Wen Tingbin,Zhu Hongping,Chen Changneng,Liu Qiutian

Fujian Inst Res Struct Matter, Acad Sinica.Fuzhou(350002);.Fuzhou (350002)

Abstract The title complex (Et₄N)₂[Fe₂S₂Br₄]was obtained from a reation system of VS/FBr₂/imnt₂/Et₄NCl.It crystallizes in the monoclinic space group P2₁/n,with $a=0.91193(2)$, $b=1.03874$ $c=1.54360(1)\text{nm}$, $\beta=105.090(1)$, $v=1.4177(5)\text{nm}^3$, $z=2$, $D_c=1.778\text{g}/\text{cm}^3$, $F(000)=748$, $R_1=0.0287$ and $wR_2=0.0640$ for 1617 reflections with $I>2.0\sigma(I)$.The cluster anion [Fe₂S₂Br₄]₂ contains a rhombic Fe₂S₂ unit in which the geomrty of the Fe sites deviates obviously from the idealized T_d symmetry leading to a D_{2h} symmetry for the cluster anion. Meanwhile,an irregular variation was observed for Fe--Br bond distances in the complex.

Key words [IRON COMPLEX](#) [SULFIDE](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [BROMINE COMPOUNDS](#) [QUATERNARY AMMONIUM COMPOUNDS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(399KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“铁络合物”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [邓玉恒](#)
- [温庭斌](#)
- [朱红平](#)
- [陈昌能](#)
- [刘秋田](#)