

Na(NTO)(H₂O)的制备、晶体结构及热力学性质研究

宋纪蓉,马海霞,孙晓红,胡荣祖,郁开北

西北大学化工系陕西省物理无机化学重点实验室;西安近代化学研究所.西安 (710061);中国科学院成都分院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

利用氢氧化钠溶液与NTO水溶液进行反应制备了标题化合物并培养出单晶。通过X射线单晶结构分析法测定分子结构和晶体结构,其分子式可表示为Na(NTO)(H₂O),晶体属单斜晶系,P2₁/c空间群,晶体学参数为:a=0.6303(1)nm,b=0.8285(1)nm,c=1.1574(2)nm,β=103.85(1)°,V=0.5868(2)nm³,D_c=1.925g/cm³,Z=4,F(000)=344,μ=0.238mm⁻¹,R=0.0259。通过Na(NTO)(H₂O)在水中溶解焓的测定,算得其标准生成焓、晶格焓和晶格能。

关键词 [氢氧化钠](#) [晶体结构](#) [热力学性质](#) [X射线衍射分析](#) [硝基化合物](#) [三唑酮](#)

分类号 [0642](#)

Preparation, crystal structure and thermodynamical properties of Na (NTO)(H₂O)

Song Jirong, Ma Haixia, Sun Xiaohong, Hu Rongzu, Yu Kaipei

Xian Modern Chem Res Inst, POB 18. Xian(710061)

Abstract Na(NTO)(H₂O) was prepared by mixing an aqueous solution of 3-nitro-1,2,4-triazol-5-one (NTO) and that of sodium hydroxide. The crystal structure of Na(NTO)(H₂O) was determined by single crystal diffraction analysis. The crystal is monoclinic, space group P2₁/c with crystal parameters of a=0.6303(1)nm, b=0.8285(1)nm, c=1.1574(2) nm, β=103.85(1)°, V=0.5868(2) nm³, D_c=1.925g/cm³, Z=4, F(000)=344, μ=0.238 mm⁻¹, R=0.0259. By measurement of the solution enthalpy of Na(NTO)(H₂O) in water at 298.15 K, the standard enthalpy of formation, lattice energy, and lattice enthalpy have been calculated.

Key words [SODIUM HYDROXIDE](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [THERMODYNAMIC PROPERTIES](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [NITRO COMPOUNDS](#) [TRIADIMEFON](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(OKB\)](#)

▶ [HTML全文\(OKB\)](#)

▶ [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“氢氧化钠”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [宋纪蓉](#)

· [马海霞](#)

· [孙晓红](#)

· [胡荣祖](#)

· [郁开北](#)