

Full Paper

超分子配合物 $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6] \cdot (\text{Hnip})_2 \cdot (\text{H}_2\text{nip})_2 \cdot (\text{CH}_3\text{NHCH}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_8$ 的直接合成, 晶体结构和热分解反应动力学 (**nip=5-nitroisophthalate**)

王丽琼, 郭金玉, 张同来, 张建国, 杨利, 乔小晶, 吴瑞凤, 于伟

北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081

收稿日期 2006-7-28 修回日期 2006-12-26 网络版发布日期 2007-5-28 接受日期

摘要 用直接法培养了配合物 $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6] \cdot (\text{Hnip})_2 \cdot (\text{H}_2\text{nip})_2 \cdot (\text{DMA})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_8$ ($\text{DMA}=\text{CH}_3\text{NHCH}_3$) 的晶体并用X射线单晶衍射, 元素分析和傅里叶变换红外光谱进行了表征。该晶体属于三斜晶系, $P-1$ 空间群, 晶胞参数为 $a=0.7012(1)\text{nm}$, $b=1.1378(2)\text{nm}$, $c=1.6612(3)\text{nm}$, $\alpha=84.92(3)^\circ$, $\beta=85.19(3)^\circ$, $\gamma=85.91(3)^\circ$ 。晶胞体积 $V=1.3128(5)\text{nm}^3$, $Z=1$, 理论密度 $D_c=1.573\text{g/cm}^3$ 。最终 R 因子 $[I>2\sigma(I)]$ 为: $R_1=0.0279$, $wR_2=0.0765$; 所有衍射点的 R 因子为: $R_1=0.0327$, $wR_2=0.0806$ 。衍射结果表明, 在晶体结构中两个Hnip分子, 两个 H_2nip 分子, 两个DMA分子和八个水分子通过氢键和 π - π 堆积作用连接到每个Co配位八面体中心上。对配合物进行了DSC和TG-DTG热分析, 根据热分析结果推测得到配合物的热分解机理, 并且用Kissinger, Ozawa, 积分法和微分法确定了最可能的动力学模型函数。

关键词 [5-硝基间苯二甲酸](#), [晶体结构](#), [热分解机理](#), [非等温反应动力学](#)

分类号

Direct Synthesis, Crystal Structure and Thermal Kinetics of Supramolecular Complex $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6] \cdot (\text{Hnip})_2 \cdot (\text{H}_2\text{nip})_2 \cdot (\text{DMA})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_8$ (**nip=5-nitroisop**

WANG Li-Qiong, GUO Jin-Yu, ZHANG Tong-Lai*, ZHANG Jian-Guo, YANG Li, QIAO Xiao-Jing, WU Rui-Feng, YU Wei

State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

Abstract The crystal of $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6] \cdot (\text{Hnip})_2 \cdot (\text{H}_2\text{nip})_2 \cdot (\text{DMA})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_8$ has been cultured using direct method and characterized by X-ray single crystal diffractometry, elemental analysis and FTIR spectroscopy. It crystallizes in triclinic system, $P-1$ space group with the cell parameters of $a=0.7012(1)\text{nm}$, $b=1.1378(2)\text{nm}$, $c=1.6612(3)\text{nm}$, $\alpha=84.92(3)^\circ$, $\beta=85.19(3)^\circ$, $\gamma=85.91(3)^\circ$, $V=1.3128(5)\text{nm}^3$, $Z=1$, $D_c=1.573\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Final R indices $[I>2\sigma(I)]$ are: $R_1=0.0279$, $wR_2=0.0765$ while R indices for all data are: $R_1=0.0327$, $wR_2=0.0806$. The Co coordination octahedra are each surrounded by two Hnip, two H_2nip , two DMA and eight water molecules that are linked by hydrogen bonds and π - π stacking interactions. Thermal analyses of DSC and TG-DTG have been performed on the complex to predict its thermal decomposition mechanism and determine the most probable kinetic model function using Kissinger, Ozawa, integral and differential methods.

Key words [5-nitroisophthalic acid](#), [crystal structure](#), [thermal decomposition mechanism](#), [nonisothermal kinetics](#)

DOI:

通讯作者 张同来 ztlbit@bit.edu.cn

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“5-硝基间苯二甲酸, 晶体结构, 热分解机理, 非等温反应动力学” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王丽琼](#)
- [郭金玉](#)
- [张同来](#)
- [张建国](#)
- [杨利](#)
- [乔小晶](#)
- [吴瑞凤](#)
- [于伟](#)