

### 3-硝基-1, 2, 4-三唑-5-酮钾配合物的制备、晶体结构和量子化学研究

宋纪蓉,陈兆旭,肖鹤鸣,胡荣祖,李福平,郁开北

西北大学化学工程系;南京理工大学化学系;西安近代化学研究所;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** 通过3-硝基-1, 2, 4-三唑-5-酮(NTO)与氢氧化钾水溶液反应,制备了标题配合物,并用TG, 元素分析, 红外光谱分析对它进行了表征。其结构用单晶分析法测定, 所得晶体学参数为 $a=0.6408(1)$ ,  $b=0.8218(1)$ ,  $c=1.2626(1)$  nm,  $\beta=100.63$  iii(1),  $V=0.6535(1)$  nm<sup>3</sup>,  $Z=4$ ,  $D_c=1.892$  g·cm<sup>-3</sup>,  $\mu=0.785$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000)=376$ ; 晶体属单斜晶系, 空间群为P21/n, 最终偏离因子R为0.0246。用EHMO计算表明, 标题化合物主要是靠静电引力形成的配合物, 中心原子K与H<sub>2</sub>O的配位较K与NTO环的结合弱, 预示热解优先脱水。

**关键词** [硝基化合物](#) [红外分光光度法](#) [元素分析](#) [晶体结构](#) [热重量分析](#) [三唑 P](#) [酮 P](#)

分类号 [0641](#)

### Preparation, crystal structure and quantum chemical investigation of [K(NTO)(H<sub>2</sub>O)]

SONG JIRONG, CHEN ZHAOXU, XIAO HEMING, HU RONGZU, LI FUPING, YU KAIBEI

**Abstract** [K(NTO)(H<sub>2</sub>O)] was prepared by mixing the aqueous solution of 3-nitro-1, 2, 4-triazol-5-onate (NTO) and potassium hydroxide and characterized by TG, elemental analysis and IR measurement. The crystal structure of [K(NTO)(H<sub>2</sub>O)] was determined by single crystal diffraction analysis. The crystal is monoclinic, space group P21/n with crystal parameters of  $a=0.6408(1)$ ,  $b=0.8218(1)$ ,  $c=1.2626(1)$  nm,  $\beta=100.63$  iii(1),  $V=0.6535(1)$  nm<sup>3</sup>,  $Z=4$ ,  $D_c=1.892$  g·cm<sup>-3</sup>,  $\mu=0.785$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000)=376$ . The final R is 0.0246. The EHMO calculation shows that the title compound forms a complex mainly through static electric attraction force. K atom combines more strongly with NTO ring than with H<sub>2</sub>O, which predicts that H<sub>2</sub>O has the priority to leave when [K(NTO)(H<sub>2</sub>O)] is heated.

**Key words** [NITRO COMPOUNDS](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [ELEMENTAL ANALYSIS](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [THERMOGRAVIMETRY](#) [PYRRODIAZOLE P](#) [KETONE P](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

#### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(374KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“硝基化合物”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [宋纪蓉](#)
- [陈兆旭](#)
- [肖鹤鸣](#)
- [胡荣祖](#)
- [李福平](#)
- [郁开北](#)