[Ba₂(H₂TNP)₂(OH)₂(H₂O)₂]·(CH₃CH₂OH)·2.5H₂O 配合物的合成、结构表征和执心+*

陈红艳,张同来,张建国,杨 利

(北京理工大学 爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 将 NaHCO, 与三硝基间苯三酚分散于蒸馏水中,加热搅拌制备出 3,5-二羟基-2,4,6-三硝基苯酚钠溶液,再与硝酸 钡水溶液反应合成了3,5-二羟基-2,4,6-三硝基苯酚钡盐。在乙醇的水溶液中培养得到了配合物([Ba₂(H₂TNP)₂(OH)₂ (H₂O)₂]·(CH₃CH₂OH)·2.5H₂O(H₂TNP: 3,5-二羟基-2,4,6-三硝基苯酚盐),其化学式为 C₁₄H₂₁Ba₂N₆O_{25.5}。对其进行 了元素分析和红外表征,利用单晶分析测定了晶体结构,晶体属于四角形晶系,空间群为 I4(1)/amd,晶体学数据为: a=19.911(3) nm,b=19.911(3) nm,c=13.265(3) nm,V=5259.0(15) nm³,Z=8,对1092 个衍射点R=0.0335。分子结 构由二个氧桥联钡的二聚体单元组成。每个 Ba 原子是 10 配位, 配位的氧原子分别为: 8 个来自 4 分子 H₂TNP, 一个来自 一分子 H₂O,一个来自氢氧根离子。金属原子由氧桥连成网状结构,非配位的水分子和乙醇分子位于晶体的空穴中。用 DSC, TG-DTG 和 IR 技术研究了标题物的热分解机理,在550 ℃,分解残渣主要为 BaCO₃。

关键词: 物理化学; 三硝基间苯三酚盐; 钡配合物; 晶体结构; 热分析

中图分类号: TJ55; O614.2 文献标识码: A

关于《含能材料》研究快报的征稿启事

为快速反映含能材料领域的最新研究成果,《含能材料》设立了研究快报栏目。

快报应突出科研工作的创新点,应反映科研工作的新理论、新观点、新方法。快报的内容包括工作目 的、研究方法、成果和结论。

快报须简明扼要地表达出科研工作的核心,力求语言精炼、层次分明、重点突出。 快报中公式或图表 不宜过多,以论点、论据、评述和结论等文字叙述为主体内容。除内容之前冠以标题外,不宜在快报中出现 其它类型的标题。快报字数应控制在 1500~2500 字,在结束页注明 3~7 个关键词。快报中要严格执行 GB3100~3102-93 有关量和单位的规定。单位名称的书写,应采用国际通用符号,不要与中文名称混用。 快报以英文撰写为佳。

№《含能材料》编辑部对于研究快报的审查与刊出将以"快"为准则。一经发表, 酌致稿酬。作者投稿至 我刊的快报,不影响其论文正文投稿其它刊社。

热忱欢迎您的来稿!