تهیه و بررسی ساختار بلوری ترکیب بیس (3\(\text{H}_{2}\text{O}\))، 5\(\text{H}_{2}\text{O}\)-ترنامتیل بنزیدینیوم) بیس (1) مونوهیدرات

(پیریدین-6-دی کروپسیلوتات نیکلات (II) مونوهیدرات)

زانت سلیمان نژاد ۱، سیما سدقی نیا، میتا نصیبی بور ۲

۱- دانشکده شیمی، پردیس علوم، دانشگاه تهران، تهران
۲- دانشکده شیمی، دانشگاه شیراز، شیراز

چکیده: ترکیب pyde و tmb به ترتیب لیگاندهای ۵\(\text{H}_{2}\text{O}\)-ترنامتیل بنزیدین و پیریدین-6-دی کروپسیلوتات نیکل (II) به همراه ساختار بلوری آن به وسیله پریاب پرتو X تعیین شد. این ترکیب در سیستم بلوری تکمیل و گروه فضایی C2/c مشابه شده است. واحدهای ترکیب حاوی نیمی از کمپلکس ابتینی C\(\text{O}_{2}\) به مولکول بنزیدینین و پیریدینیون شده به عنوان کاتيون همراه و نیمی از پریاب C-H...\(\pi\) یا C-O...\(\pi\) به همراه برم کنش‌های \(\pi\) و \(\pi\) و N-H...\(\pi\) نشده است. این ترکیب وجدبینه هیدروژن قوی \(\text{O-H}\) و N-H...\(\pi\) موجب خودتجمع و تشکیل خاص مولکول‌های جدید شده‌اند.

واژه‌های کلیدی: ترکیب‌های بلوری، بیج درآمدهای، 5\(\text{H}_{2}\text{O}\)-ترنامتیل بنزیدین، بلورشناسی، ساختار

پیوندهای هیدروژنی اساس خاص آراوهای وسیعی از سیستم-های هستند که در هزینه‌های مختلف و وسیع علم از برم کنش‌های طرفین بارها در ترکیب‌های ژنتیکی دانسته می‌شود. 

**مقدمه**

پیوندهای هیدروژنی اساس خاص آراوهای وسیعی از سیستم-های هستند که در هزینه‌های مختلف و وسیع علم از برم کنش‌های طرفین بارها در ترکیب‌های ژنتیکی دانسته می‌شود. 

**گروه پژوهشی ما تلاش دارد تا بر پایه اطلاعات موجود با توجه به قابلیت‌های فضایی، ترکیب‌های نیکل (II) پیوندهای دیگر را معرفی کنیم.**

پیوندهای هیدروژنی اساس خاص آراوهای وسیعی از سیستم-های هستند که در هزینه‌های مختلف و وسیع علم از برم کنش‌های طرفین بارها در ترکیب‌های ژنتیکی دانسته می‌شود. 

**تاریخ**

تاریخ تولید مقاله: ۱۳۸۵/۰۹/۰۹

**منابع**


بحث و نتیجه‌گیری
ساختار مولکولی ترکیب (Htmb)$_2$[Ni(pydc)$_2$].H$_2$O (1) در شکل 1 نشان داده شده است. ساختار بلور این ترکیب در حالت نیم ساختاری به نام (Htmb)$_2$[Ni(pydc)$_2$].H$_2$O پرداخته شده است. در حالت دمای 150 کلوین جمع‌آوری شده است. ساختار بلور از روش مستقیم تهیه و اصلاح نتایج به‌وسیله روش‌های مختلف ماتریس کامل بر پایه F$^2$ با نرم‌افزار SHELX-97 انجام شده است. [12] برای تهیه تصادفی از نرم‌افزار مکروری استفاده شده است.

قابل اطلاعات بلورشناوی (cif) در مرکز داده‌های CCDC به عنوان کمپیوتری CCDC (2) با کد 1491983 ثبت شده و از طریق آدرس www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html دریافت است.

روش آزمایش
محلول 0.2 میلی مول (8.0 x 10$^{-5}$ در-ترانزیت بنزیدین) در دی کلروفان (4 میلی لیتر) به دقت بهصورت لایه-ای به زیر محلول 0.1 میلی مول (8.0 x 10$^{-5}$ در-ترانزیت بنزیدین) دی کلروفان اسید و 0.8 میلی مول (20 x 10$^{-5}$ در-ترانزیت بنزیدین) نیکل نیترات شش آبی در 60 میلی لیتر آب به مدت 5 دقیقه در دمای 70 درجه سلسیوس مخلوط شده و افزوده شد. پس از دو روز بلورهای مکمک شکل به رنگ سیز-آبی در حد فاصل دو لایه با ماندگاری 25 درصد پیدا شده که در دمای بالای 300 درجه سلسیوس تجزیه شدند.

شکل 1 ساختار مولکولی ترکیب (1) که مولکول آب برای وضوح حذف شده است (کد تقریبی برای اتم‌هایی که در کنار نام و شماره آنها حرف U امده، 1/2 z, -2 x, 0, y, z- است).
جدول 1 داده‌های بلورشناسی ترکیب (Hmb)[Ni(pydc)2].H2O

<table>
<thead>
<tr>
<th>C. H. N. Ni O.</th>
<th>فرمول</th>
<th>وزن فرمولی (گرم برمول)</th>
<th>دما (کلوین)</th>
<th>طول موج امکان‌پذیر اکستریم</th>
<th>نسبت مولی</th>
<th>گروه فضایی</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>88.84</td>
<td>0.26</td>
<td>769.86</td>
<td>429.72</td>
<td>0.10173</td>
<td>197/1</td>
<td>P1</td>
</tr>
<tr>
<td>34.7</td>
<td></td>
<td>378.22</td>
<td>194.86</td>
<td>0.32</td>
<td>C2</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>15.90</td>
<td>0.0043</td>
<td>278.22</td>
<td>150.90</td>
<td>2.0025</td>
<td>1</td>
<td>P2</td>
</tr>
<tr>
<td>15.90</td>
<td>0.0043</td>
<td>278.22</td>
<td>150.90</td>
<td>2.0025</td>
<td>1</td>
<td>P2</td>
</tr>
<tr>
<td>15.90</td>
<td>0.0043</td>
<td>278.22</td>
<td>150.90</td>
<td>2.0025</td>
<td>1</td>
<td>P2</td>
</tr>
<tr>
<td>15.90</td>
<td>0.0043</td>
<td>278.22</td>
<td>150.90</td>
<td>2.0025</td>
<td>1</td>
<td>P2</td>
</tr>
</tbody>
</table>

جهان اتم اکسیژن جایگاه‌های استوایی و دو اتم نیترگون جایگاه‌های محوری این هست و چگونه را انتقال می‌کند. مهان گونه که در جدول 2 امده است، زایمی (O3)Ni(1)-O(1) و O3U-Ni(1) به تبع آن زایمی معادل آن به لحاظ تقارنی (O3U-Ni(1)) 176.25 درجه هستند که تعداد اتم اتم-1 O(2)U های اکسیژن در هر تقارنی استحکام حول اتم نیتر گرفته‌اند. زایمی (O3)Ni(1)-O(1) درجه و O(3)U-Ni(1)O(2) 49.82 درجه و درجه 92.14 درجه هستند که به دو مولکول اکسیژن استحکام به یکدیگر قائل‌ریاست هستند. این یافته‌ها به شکل یک هست و چگونه

واچمه به شکل 1 چهار گروه کربوکسیلی‌انیک حول اتم نیترگون (I) C-O و جواد داندو. مقایسه طول پیوندهای C-O به پیوندهای اکسیژن (C17-O3 و C24-O2)
جدول 2 یوبونده و روابط ظرفی (به ترتیب و بر حسب انگستروم) در ترکیب \((\text{Hmb})_2[\text{Ni(pydc)}_2].\text{H}_2\text{O})\)

<table>
<thead>
<tr>
<th>طول یوبونه ((\text{Å}))</th>
<th>زاویه یوبونه ((6^\circ))</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>(\text{Ni}(1)-\text{N}(3))</td>
<td>1.925(3)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{Ni}(1)-\text{O}(2))</td>
<td>2.113(3)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{Ni}(1)-\text{O}(3))</td>
<td>2.049(4)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{Ni}(1)-\text{O}(5))</td>
<td>2.046(3)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(17)-\text{O}(3))</td>
<td>1.176(4)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(17)-\text{O}(4))</td>
<td>1.252(4)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(24)-\text{O}(1))</td>
<td>1.235(4)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(24)-\text{O}(2))</td>
<td>1.184(2)</td>
</tr>
</tbody>
</table>

ابعاد \((7.31 \text{ Å})\) از پیک‌ها در طول ترکیب \((\text{Hmb})_2[\text{Ni(pydc)}_2].\text{H}_2\text{O})\)

<table>
<thead>
<tr>
<th>افزودن: (\text{N}(3)-\text{Ni}(1)-\text{O}(3))</th>
<th>افزودن: (\text{Ni}(1)-\text{O}(3))</th>
<th>افزودن: (\text{Ni}(1)-\text{O}(3))</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>(\text{Ni}(1)-\text{O}(2))</td>
<td>2.113(3)</td>
<td>O(3)-\text{Ni}(1)-O(2)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{Ni}(1)-\text{O}(5))</td>
<td>2.046(3)</td>
<td>O(2)-\text{Ni}(1)-O(2)U</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(17)-\text{O}(3))</td>
<td>1.176(4)</td>
<td>N(3)-\text{Ni}(1)-O(3)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(17)-\text{O}(4))</td>
<td>1.252(4)</td>
<td>N(3)-\text{Ni}(1)-O(3)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(24)-\text{O}(1))</td>
<td>1.235(4)</td>
<td>C(17)-O(3)-\text{Ni}(1)</td>
</tr>
<tr>
<td>(\text{C}(24)-\text{O}(2))</td>
<td>1.184(2)</td>
<td>C(24)-O(2)-\text{Ni}(1)</td>
</tr>
</tbody>
</table>

جدول 3 یوبونده هیدروژنی (بر حسب انگستروم) در ترکیب \((\text{Hmb})_2[\text{Ni(pydc)}_2].\text{H}_2\text{O})\)

<table>
<thead>
<tr>
<th>(D-H\ldots A)</th>
<th>(d(D-H))</th>
<th>(d(H\ldots A))</th>
<th>(d(D\ldots A))</th>
<th>(&lt;DHA&gt;)</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>(N(1)-H(1B)...O(1))</td>
<td>0.85</td>
<td>2.48</td>
<td>2.32(3)</td>
<td>133.8</td>
</tr>
<tr>
<td>(N(1)-H(1D)...O(2))</td>
<td>0.85</td>
<td>2.01</td>
<td>2.84(3)</td>
<td>169.3</td>
</tr>
<tr>
<td>(N(1)-H(1C)...O(4))</td>
<td>0.85</td>
<td>1.88</td>
<td>2.46(3)</td>
<td>158.5</td>
</tr>
<tr>
<td>(N(2)-H(2B)...O(1))</td>
<td>0.85</td>
<td>2.50</td>
<td>3.34(3)</td>
<td>173.8</td>
</tr>
<tr>
<td>(N(2)-H(2C)...O(4))</td>
<td>0.85</td>
<td>1.35</td>
<td>3.02(3)</td>
<td>138.8</td>
</tr>
</tbody>
</table>

تبدیل‌های تقاضای بکار رفته برای حل انتخاب‌های هم از:

#1 -x,y,-z+1/2  #2 x,y,z-1/2  #3 -x,-y+1,z  #4 -x-1/2,y-1/2,z-1/2  #5 x-1/2,y+1/2,z-1/2
برداشت

پرتوی سنتز شده و ساختار بلوری آن با روش بلورشناسی تعیین شده است. ساختار گزارش شده را می‌توان ساختار سوپریونیک دانست که پایداری خود را از طریق برهم کنش‌های غیرکووالانسی بین بخش گروهی [Ni(pydc)$_2$]$_n$ کاتیونی و مولکول آب به دست آورده است. در ترکیب 1 (Htmb)$_3$Ni(pydc)$_2$.H$_2$O شیکه‌ای از بیوندهای هیدروزئی و برهم کنش‌های بین بخش می‌باشد که C-H...π و π...π ترکیب سوپریونیک (Htmb)$_3$Ni(II) ایفا می‌کند.

مراجع


شکل 2: ساختار انباشتی ترکیب ۱ و مولکول‌های آب (قرمز) درون حفره‌های حاصل از بیوندهای هیدروزئی بین اجزای کاتیونی (آبی) رنگ و آنیونی (سرز رنگ).


