

# 氰根桥连的异金属配位聚合物 $\{[\text{Ni}(\text{pn})_2][\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]\}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ( $\text{pn} = 1, 3$ -丙二胺, $\text{bipy} = 2, 2'$ -联吡啶)的合成与结构

常 菲 孙豪岭 高 松\*

(北京大学化学与分子工程学院, 稀土材料化学及应用国家重点实验室, 北京 100871)

以  $[\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]^{2-}$  为建筑块和  $[\text{Ni}(\text{pn})_2]^{2+}$  在水溶液中反应, 合成了  $\{[\text{Ni}(\text{pn})_2][\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]\}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{pn} = 1, 3$ -丙二胺)。通过 X-射线单晶衍射确定了其晶体结构。该配合物属单斜晶系,  $P2_1/n$  空间群, 晶胞参数为:  $a = 16.0317(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 18.6175(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 18.5124(3) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90.00^\circ$ ,  $\beta = 115.2447(9)^\circ$ ,  $\gamma = 90.00^\circ$ ,  $V = 4997.7(17) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $D_c = 1.462 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,  $\mu = 1.369 \text{ mm}^{-1}$ ,  $F(000) = 2296.0$ ,  $R_1 = 0.0359$ ,  $wR_2 = 0.0514$ 。配合物中 Ni-CN-Fe 的连接存在直线型和弯折型两种构型, 从而产生氰根桥连的一维螺旋链结构。

关键词: 配位聚合物 晶体结构 氰根 螺旋链  
分类号: O614.81

以氰根作为桥连基团的过渡金属配位化合物因其具有丰富的结构类型和独特的性质而倍受关注。对其研究兴趣和重点主要集中在设计合成  $[\text{M}(\text{CN})_6]^{n-}$  ( $\text{M} = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Cr}$ ),  $[\text{M}(\text{CN})_8]^{n-}$  ( $\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$ ),  $[\text{M}(\text{CN})_7]^{n-}$  ( $\text{M} = \text{Mo}, \text{W}$ ) 等阴离子作为建筑块的过渡金属配位聚合物和簇合物<sup>[1-17]</sup>。例如, 具有高  $T_c$  (居里温度) 的分子磁体  $\text{C}(\text{I})_2\text{V}[\text{Cr}(\text{CN})_6]_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{C} = \text{碱金属}$ ,  $T_c \approx 295 \sim 400 \text{ K}$ )<sup>[2-3]</sup>, 以及具有高自旋值的单分子簇合物  $\{\text{Mn}_6[\text{Mo}(\text{CN})_8]_6 \cdot 24 \text{ Me}(\text{OH})\} \cdot 5 \text{ Me}(\text{OH}) \cdot 2 \text{ H}_2\text{O}$ <sup>[13]</sup> 等。最近, 也有二氰根的  $[\text{Ru}(\text{acac})(\text{CN})_2]^-$  ( $\text{Hacac} = \text{acetylacetone}$ ) 作为结构单元的报道<sup>[18]</sup>。对于以四氰根的  $[\text{Fe}(\text{CN})_4\text{L}]^{2-}$  ( $\text{L} = \text{bipy}, \text{phen}$ ) 为结构单元的过渡金属配位聚合物, 还不多见<sup>[19]</sup>。本文首次报道了以  $[\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]^{2-}$  为结构单元的一维螺旋状结构的异金属配位聚合物  $\{[\text{Ni}(\text{pn})_2][\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]\}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  的合成与结构。

## 1 实验部分

### 1.1 仪器与试剂

本实验中所使用的试剂  $\text{Ni}(\text{pn})_2\text{Cl}_2$ <sup>[20]</sup> 和  $\text{K}_2[\text{Fe}$

$(\text{CN})_4(\text{bipy})] \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ <sup>[21]</sup> 均按文献中的方法制备。其它均为市售分析纯试剂。元素分析所使用的仪器为 German Elementar Vario EL 元素分析仪, 进行红外光谱表征的仪器为 Nicolet Magna-IR 750 红外光谱仪, 晶体结构测定所使用的仪器为 NONIUS Kappa CCD X-ray 衍射仪。

### 1.2 配位聚合物 $\{[\text{Ni}(\text{pn})_2][\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]\}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ 的合成

$\text{Ni}(\text{pn})_2\text{Cl}_2$  (1 mmol, 0.278 g) 和  $\text{K}_2[\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (1 mmol, 0.47 g) 分别溶解于 10 mL 水中, 将  $\text{Ni}(\text{pn})_2\text{Cl}_2$  的水溶液缓慢注入到含有  $\text{K}_2[\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]$  的溶液中, 搅拌 2 分钟后过滤, 滤液在室温下放置三天后生长出适合结构测定的暗红色柱状晶体, 产率为 52%。元素分析: 分子式  $\text{Fe}_2\text{Ni}_2\text{C}_{40}\text{N}_{20}\text{H}_{62}\text{O}_5$  ( $M_r = 1100.22$ ), 计算值 (%): C 43.67, H 5.68, N 25.46; 实验值: C 44.09, H 5.883, N 25.17; IR ( $\nu, \text{cm}^{-1}$ ): 2043s, 2050s, 2058s, 2081m。

### 1.3 晶体结构测定

选取尺寸为  $0.08 \times 0.18 \times 0.60 \text{ mm}$  的暗红柱状晶体, 在 NONIUS Kappa CCD X-射线衍射仪上采用经石墨单色化的  $\text{MoK}\alpha$  射线 ( $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ ), 在

收稿日期: 2001-10-30。收修改稿日期: 2001-11-08。

国家重点基础研究发展规划项目 (No. G1998061305); 国家杰出青年科学基金和国家自然科学基金资助项目 (No. 20023005, 29831010), 国家教育部资助优秀年轻教师基金资助。

\* 通讯联系人。E-mail: gaosong@pku.edu.cn

第一作者: 常 菲, 女, 28 岁, 博士研究生; 研究方向: 功能配合物。

293K 温度下收集到 10930 个独立衍射点, 其中  $I \geq 2\sigma(I)$  的可观测点为 6940 个。数据进行了经验吸收校正。利用直接法和差值 Fourier 合成确定非氢原子坐标和水分子上的氢原子, 通过全矩阵最小二乘法进行结构和各向异性温度因子修正。最终偏离因子  $R = 0.0359$ ,  $wR(F^2) = 0.0514$ ,  $GOF = 0.966$  ( $w = 1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.0158P)^2 + 0.0000P]$ ,  $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$ )。最大和最小残峰值为: 0.470, -0.378。结构计算使用 SHELX97 程序完成。

## 2 结果与讨论

标题化合物的非氢原子坐标和热参数见表 1, 主要键长、键角数据列于表 2。

表 1 标题化合物的原子坐标和热参数

Table 1 Atomic Coordinates ( $\times 10^4$ ) and Equivalent Isotropic Displacement Parameters ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) for Title Compound

| atom  | x       | y       | z        | $U(\text{eq})$ | atom  | x       | y       | z        | $U(\text{eq})$ |
|-------|---------|---------|----------|----------------|-------|---------|---------|----------|----------------|
| Ni(2) | 1332(1) | 2508(1) | 4295(1)  | 29(1)          | C(5)  | 2835(2) | 2735(1) | 8275(1)  | 26(1)          |
| Fe(2) | 2280(1) | 2972(1) | 7156(1)  | 25(1)          | C(29) | 1933(2) | 4359(1) | 7622(1)  | 31(1)          |
| Ni(1) | 3023(1) | 2084(1) | 9911(1)  | 27(1)          | C(13) | 2315(2) | 190(2)  | 12517(2) | 42(1)          |
| Fe(1) | 2003(1) | 1655(1) | 12046(1) | 27(1)          | C(25) | 683(2)  | 3617(2) | 7356(1)  | 36(1)          |
| N(16) | 3123(1) | 3813(1) | 7379(1)  | 26(1)          | C(19) | 2580(2) | 502(2)  | 9349(2)  | 41(1)          |
| N(5)  | 3171(1) | 2586(1) | 8947(1)  | 36(1)          | C(14) | 1397(2) | 200(2)  | 11853(2) | 41(1)          |
| N(9)  | 2710(1) | 845(1)  | 12730(1) | 36(1)          | C(32) | 4194(2) | 5053(2) | 7741(1)  | 46(1)          |
| N(20) | 2229(2) | 3222(1) | 4065(2)  | 42(1)          | C(21) | 4269(2) | 733(2)  | 10278(2) | 49(1)          |
| N(13) | 3704(2) | 2913(1) | 10745(1) | 45(1)          | C(2)  | 2925(2) | 2357(1) | 12547(1) | 35(1)          |
| O(3)  | 351(2)  | 1849(1) | 8165(2)  | 63(1)          | C(33) | 4488(2) | 4434(2) | 7518(1)  | 44(1)          |
| N(12) | 2316(2) | 1252(1) | 9089(1)  | 37(1)          | C(38) | 342(2)  | 3947(2) | 3658(2)  | 49(1)          |
| N(19) | 225(2)  | 3164(1) | 3563(1)  | 43(1)          | C(31) | 3366(2) | 5045(2) | 7786(1)  | 43(1)          |
| N(15) | 1520(1) | 3714(1) | 7368(1)  | 27(1)          | C(27) | 674(2)  | 4767(2) | 7886(2)  | 51(1)          |
| N(4)  | 2825(1) | 1546(1) | 10823(1) | 36(1)          | C(28) | 1527(2) | 4892(2) | 7892(1)  | 44(1)          |
| N(10) | 1106(1) | 863(1)  | 11554(1) | 34(1)          | C(15) | 836(3)  | -406(2) | 11560(2) | 58(1)          |
| N(11) | 4273(2) | 1520(1) | 10188(2) | 41(1)          | C(20) | 3579(2) | 364(2)  | 9537(2)  | 50(1)          |
| N(8)  | 5329(1) | 3108(1) | 5329(1)  | 36(1)          | C(9)  | 3524(2) | 896(2)  | 13376(2) | 51(1)          |
| N(8)  | 1252(2) | 2367(1) | 11339(1) | 31(1)          | C(24) | 1768(2) | 3437(2) | 9548(2)  | 51(1)          |
| C(30) | 2830(2) | 4423(1) | 7601(1)  | 30(1)          | C(35) | 2305(3) | 1056(2) | 4936(2)  | 57(1)          |
| N(18) | 2449(2) | 1837(1) | 4974(2)  | 43(1)          | C(26) | 242(2)  | 4129(2) | 7601(2)  | 47(1)          |
| N(14) | 1781(2) | 2648(1) | 9632(2)  | 38(1)          | C(23) | 2444(3) | 3799(2) | 10295(2) | 61(1)          |
| C(1)  | 1476(2) | 1846(1) | 12788(1) | 29(1)          | C(22) | 3443(2) | 3663(2) | 10495(2) | 58(1)          |
| N(2)  | 3511(2) | 2780(1) | 12841(1) | 57(1)          | C(40) | 2079(2) | 4002(2) | 4082(2)  | 50(1)          |
| N(3)  | 807(2)  | 2791(1) | 10881(1) | 45(1)          | O(1)  | 4656(2) | 1210(2) | 6278(2)  | 129(1)         |
| C(8)  | 1777(2) | 3121(1) | 6017(1)  | 28(1)          | C(16) | -38(3)  | -326(2) | 10969(2) | 65(1)          |
| C(18) | 244(2)  | 925(2)  | 10975(2) | 47(1)          | C(37) | 602(3)  | 1042(2) | 4644(2)  | 64(1)          |
| O(2)  | 4078(2) | 2570(2) | 4603(2)  | 98(1)          | C(11) | 3593(3) | -369(2) | 13582(3) | 76(1)          |
| N(6)  | 805(2)  | 1813(1) | 6754(1)  | 54(1)          | C(36) | 1578(3) | 847(2)  | 5206(2)  | 61(1)          |
| N(7)  | 3508(2) | 1840(1) | 6911(1)  | 50(1)          | C(17) | -341(3) | 346(2)  | 10677(2) | 60(1)          |
| C(34) | 3940(2) | 3828(2) | 7340(1)  | 36(1)          | C(39) | 1126(2) | 4211(2) | 3480(2)  | 60(1)          |
| C(7)  | 3066(2) | 2286(1) | 7013(1)  | 31(1)          | C(12) | 2758(3) | -430(2) | 12939(2) | 62(1)          |
| C(4)  | 2532(2) | 1535(1) | 11295(1) | 30(1)          | C(10) | 3977(2) | 293(2)  | 13815(2) | 68(1)          |
| N(17) | 455(2)  | 1824(2) | 4593(2)  | 48(1)          | N(1)  | 1209(1) | 1952(1) | 13268(1) | 36(1)          |
| C(6)  | 1384(2) | 2244(1) | 6929(1)  | 32(1)          |       |         |         |          |                |

$U(\text{eq})$  is defined as one third of the trace of the orthogonalized  $U_{ij}$  tensor.

金属原子的配位及连接情况如图 1 所示。Ni 和 Fe 均为六配位的八面体构型。含有四个氰根的  $[\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]^{2-}$  与六氰根的  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{2-}$  配位构型相似, 只是  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{2-}$  中的两个赤道位置的氰根被一个 2, 2'-联吡啶所取代。每个 Fe 原子与一个 2, 2'-联吡啶上的两个氮原子螯合配位, 两个氮原子占据两个赤道位置, 另外两个赤道位置和两个轴向位置分别被四个氰根所占据。处于赤道位置的两个氰根利用碳原子以端基形式与 Fe 配位, 另外两个轴向位置的氰根则作为桥, 各连接一个 Ni 离子。每个 Ni 原子(如 Ni1)与四个来自两个 1, 3-丙二胺分子的氮原子(N11, N12; N13, N14)以螯合方式配位, 四个氮

表 2 标题化合物中的部分键长与键角

Table 2 Bond Lengths(Å) and Angles(°) for Title Compound

|   |            |             |          |            |            |             |            |
|---|------------|-------------|----------|------------|------------|-------------|------------|
| Ni(1)-N(4)  | 2.102(2)   | Ni(1)-N(14) | 2.111(2) | Ni(1)-N(5) | 2.1144(19) | Ni(1)-N(11) | 2.123(2)   |
| Ni(1)-N(13)   | 2.126(3)   | Ni(1)-N(12) | 2.129(2) | Ni(2)-N(8) | 2.1275(19) | Fe(2)-C(6)  | 1.887(3)   |
| Fe(2)-C(7)  | 1.890(3)   | Fe(2)-C(5)  | 1.925(2) | Fe(2)-C(8) | 1.929(2)   | Fe(2)-N(15) | 1.9889(19) |
| Fe(2)-N(16)   | 1.9934(19) | N(6)-C(6)   | 1.164(3) | N(7)-C(7)  | 1.157(3)   | N(5)-C(5)   | 1.159(2)   |
| N(8)-C(8)   | 1.159(2)   |             |          |            |            |             |            |
| N(11)-Ni(1)-N(12) 88.41(11) N(11)-Ni(1)-N(13) 92.58(12) N(14)-Ni(1)-N(12) 91.56(10) N(14)-Ni(1)-N(13) 87.46(12) |            |             |          |            |            |             |            |
| C(5)-Fe(2)-C(8) 174.21(9) C(5)-N(5)-Ni(1) 147.51(18) C(8)-N(8)-Ni(2) 147.67(17) N(5)-C(5)-Fe(2) 179.3(2)        |            |             |          |            |            |             |            |
| N(8)-C(8)-Fe(2) 170.13(19) C(6)-Fe(2)-C(7) 88.44(10) C(6)-Fe(2)-N(15) 94.02(10) N(15)-Fe(2)-N(16) 80.35(19)     |            |             |          |            |            |             |            |
| C(7)-Fe(2)-N(16) 97.27(10)  |            |             |          |            |            |             |            |

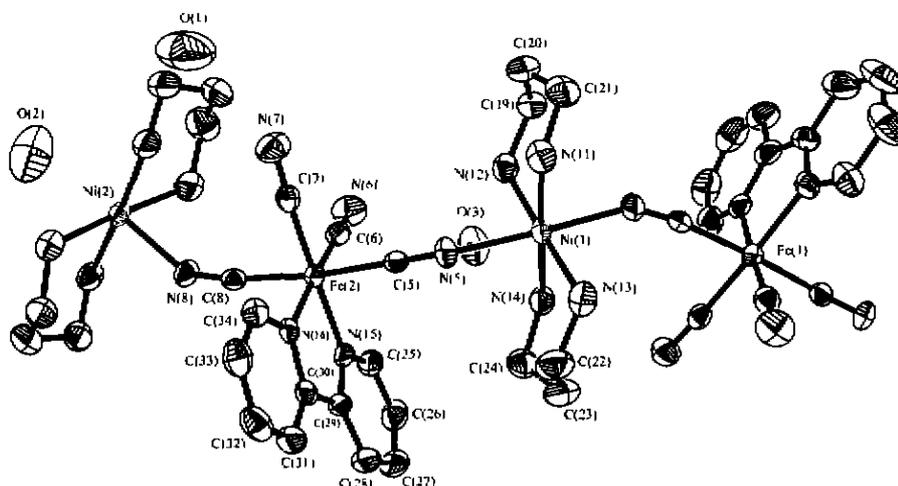


图 1 标题聚合物的配位结构图

Fig. 1 Molecular structure of the title compound

原子占据了 Ni 原子的八面体配位构型的赤道位置。两个  $[\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bipy})]^{2-}$  各提供一个氰根上的氮原子在轴向位置与 Ni 离子配位形成八面体配位构型(Ni-N 的键长范围为: 2.102 ~ 2.128Å)。

如图 1 所示, 尽管氰根本身是直线型配体, 但是结构中 Ni-CN-Fe 连接存在直线型和弯折型两种构型: Ni2-N8-C8-Fe2 的连接为弯折型, N8-C8-Fe2 为 170.13(19)°, C8-N8-Ni2 为 147.67(17)°; Ni1-N5-C5-Fe2 的连接中, Fe 与 CN 的连接基本呈直线型, N(5)-C(5)-Fe(2) 为 179.3°。1999 年, Tatsumi K. 等报道了以氰根为桥的螺旋链化合物  $\{[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{WS}_3]_2\text{Ag}_2(\text{CN})\}_n$  [22], 其中, 氰根只以一种桥连模式存在, C 端和 N 端分别连接两个 Ag 原子形成直线型连接模式(Ag-CN-Ag)。文献报道的另一例化合物  $[\text{Eu}_4\text{N}[\text{Cp}^*\text{Ir}(\text{CN})_3][\text{Rh}_2(\text{OAc})_4]]$  [23] 含有一维的阴离子异金属螺旋链, 氰根的碳端连接 Ir 原子, 而氮端连 Rh 原子形成类似于 Ni2-N8-C8-Fe2 的弯折型 Rh-NC-Ir 连接。本文所报道的化合物同时含有氰根

的直线和弯折构型, 存在氰根的弯折型桥联模式的原因可能与螯合联吡啶、丙二胺的空间位阻有关, 而由于弯折型桥联模式的存在, 使得氰根将 Fe 和 Ni 连接形成一维无限延伸的螺旋链结构(图 2), 螺距(Ni-Fe-Ni-Fe-Ni)为 19.217Å。

本文首次用抗磁的四氰根的  $[\text{Fe}(\text{CN})_4]$

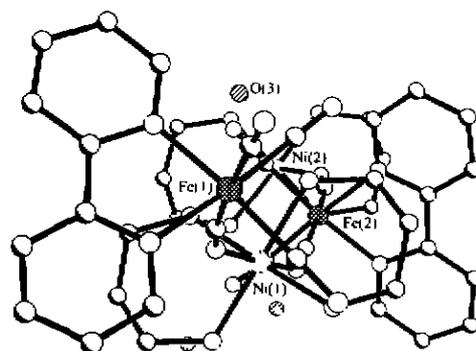


图 2 标题配合物的螺旋结构(从 c 方向观察)  
Fig. 2 1D helical chain structure in the title compound (view from c axis)

(bipy)]<sup>2-</sup> 作为建筑块合成了一个异金属螺旋链, 将顺磁的 [Fe(CN)<sub>4</sub>(bipy)]<sup>-</sup> 作为建筑单元构造磁性配位高分子的工作正在进一步进行中。

## 参 考 文 献

- [1] Dunbar K. R., Heintz R. A. *Progress. Inorg. Chem.*, (Kenneth D. K. Ed.), **1997**, **54**, p118 and references therein.
- [2] Verdaguer M., Bleuzen A., Marvaud V., Vaissermann J., Seuleiman M., Desplanches C., Seuille A., Train C., Garde R., Gelly G., Lomenech C., Rosenman I., Veillet P., Cartier C., Villain F. *Coord. Chem. Rev.*, **1999**, **190** ~ **192**, 1023.
- [3] Ferlay S., Mallah T., Ouahes R., Veillet P., Verdaguer M. *Nature*, **1995**, **378**, 701.
- [4] Holmes S. M., Girolami G. S. *J. Am. Chem. Soc.*, **1999**, **121**, 5593.
- [5] Hatlevik Ø., Buschmann W. E., Zhang J., Manson J. L., Miller J. S. *Adv. Mater.*, **1999**, **11**, 914.
- [6] Sato O., Iyoda T., Fujishima A., Hashimoto K. *Science*, **1996**, **272**, 704.
- [7] Kou H. Z., Gao S., Sun B. W., Zhang J. *Chem. Mater.*, **2001**, **13**, 1431.
- [8] Ma B. Q., Gao S., Su G., Xu G. X. *Angew. Chem.-Int. Edit.*, **2001**, **40**, 734.
- [9] Larionova J., Sanchiz J., Gohlen S., Ouahab L., Kahn O. *Chem. Commun.*, **1998**, 953.
- [10] Sra A. K., Rombaut G., Lahitète F., Gohlen S., Ouahab L., Mathonière C., Yakhmi J. V., Kahn O. *New J. Chem.*, **2000**, **24**, 871.
- [11] Larionova J., Clérac R., Sanchiz J., Kahn O., Gohlen S., Ouahab L. *J. Am. Chem. Soc.*, **1998**, **120**, 13088.
- [12] Sieklucka B., Szklarzewicz J., Kemp T. J., Errington W. *Inorg. Chem.*, **2000**, **39**, 5156.
- [13] Larionova J., Gross M., Pilkington M., Andres H., Stoeckli-Evans H., Güdel H. U., Decurtins S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2000**, **39**, 1605.
- [14] Zhong Z. J., Seino H., Mizobe Y., Hidai M., Verdaguer M., Ohkoshi S., Hashimoto K. *Inorg. Chem.*, **2000**, **39**, 5095.
- [15] Zhong Z. J., Seino H., Mizobe Y., Hidai M., Fujishima A., Ohkoshi S., Hashimoto K. *J. Am. Chem. Soc.*, **2000**, **122**, 2952.
- [16] Lu J., Harrison W. T. A., Jacobson A. J. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **1995**, **34**, 2557.
- [17] Nowicka B., Hagiwara M., Wakatsuki Y., Kisch H. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **1999**, **72**, 441.
- [18] Yeung W. F., Man W. L., Wong W. T., Lau T. C., Gao S. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2001**, **40**, 3031.
- [19] Lescouëzec R., Loret F., Julve M., Vaissermann J., Verdaguer M., Llusaar R., Uriel S. *Inorg. Chem.*, **2001**, **40**, 2065.
- [20] The Chemistry Society of Japan (日本化学会), Translated by CAO Hui-Min (曹蕙民) *Handbook on Synthesis of Inorganic Compounds*, Vol. 3. (无机化合物合成手册, 第三卷), **1976**, p308.
- [21] Schlit A. A., Cresswell A. M. *Talanta*, **1966**, **13**, 911.
- [22] Lang J.-P., Tatsumi K. *Inorg. Chem.*, **1999**, **38**, 1364.
- [23] Contakes S. M., Klausmeyer K. K., Rauchfuss T. B. *Inorg. Chem.*, **2000**, **39**, 2069.

## Synthesis and Crystal Structure of a Cyano-bridged Bimetallic Coordination Polymer [[Ni(pn)<sub>2</sub>][Fe(CN)<sub>4</sub>(bipy)]]<sub>2</sub> · 3H<sub>2</sub>O (pn = 1, 3-diaminopropane, bipy = 2, 2'-bipyridine)

CHANG Fei SUN Hao-Ling GAO Song\*

(State Key Laboratory of Rare Earth Materials Chemistry and Applications, College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871)

The reaction of [Fe(CN)<sub>4</sub>(bipy)]<sup>2-</sup> as building block with [Ni(pn)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> affords to a coordination polymer [[Ni(pn)<sub>2</sub>][Fe(CN)<sub>4</sub>(bipy)]]<sub>2</sub> · 3H<sub>2</sub>O. X-ray single crystal analysis reveals that the structure consists of 1D helical chain, in which linear and bend bridge modes for Ni-NC-Fe exhibit. It crystallizes in monoclinic crystal system, space group *P2<sub>1</sub>/n*, *a* = 16.0317(3) Å, *b* = 18.6175(2) Å, *c* = 18.5124(3) Å, *α* = 90.00°, *β* = 115.2447(9)°, *γ* = 90.00°, *V* = 4997.7(17) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *D<sub>c</sub>* = 1.462 g · cm<sup>-3</sup>, *μ* = 1.369 mm<sup>-1</sup>, *F*(000) = 2296.0, *R<sub>1</sub>* = 0.0359, *wR<sub>2</sub>* = 0.0514, for 6940 observed reflections (*I* ≥ 2σ(*I*)).

**Keywords:** coordination polymer crystal structure cyanide helical chain