

三环己基锡吡咯啉二硫代氨基甲酸酯和三环己基锡邻苯二甲酰亚胺配合物的合成、结构和量子化学研究

邱代治^{*1} 蒋伍玖^{1,2} 冯泳兰¹ 张复兴¹ 王剑秋¹ 庾江喜¹

(¹ 功能金属有机材料湖南省普通高等学校重点实验室, 衡阳师范学院化学与材料科学系, 衡阳 421008)

(² 湘潭大学化学学院, 环境友好化学与应用省部共建教育部重点实验室, 湘潭 411105)

摘要: 三环己基氢氧化锡分别与吡咯啉二硫代氨基甲酸钠和邻苯二甲酰亚胺反应, 合成了三环己基锡吡咯啉二硫代氨基甲酸酯(**1**)和三环己基锡邻苯二甲酰亚胺配合物(**2**)。化合物经 IR、¹H NMR、元素分析表征, 用 X 射线衍射法测定了晶体结构, 化合物 **1** 属正交晶系, 空间群 $P2_12_12_1$, 晶体学参数: $a=1.228\ 06(3)$ nm, $b=1.238\ 20(2)$ nm, $c=1.662\ 54(3)$ nm, $Z=4$, $V=2.528\ 03(9)$ nm³, $D_c=1.351$ g·cm⁻³, $\mu(\text{Mo } K\alpha)=1.184$ mm⁻¹, $F(000)=1\ 072$, $R_1=0.048\ 7$, $wR_2=0.121\ 0$; 化合物 **2** 属正交晶系, 空间群 $P2_12_12_1$, 晶体学参数: $a=1.244\ 70(19)$ nm, $b=1.269\ 45(19)$ nm, $c=1.587\ 7(2)$ nm, $Z=4$, $V=2.508\ 7(6)$ nm³, $D_c=1.362$ g·cm⁻³, $\mu(\text{Mo } K\alpha)=1.039$ mm⁻¹, $F(000)=1\ 064$, $R_1=0.049\ 9$, $wR_2=0.128\ 4$, 中心锡原子均为畸变四面体构型。对化合物进行了量子化学从头计算, 探讨了化合物的稳定性、分子轨道能量以及前沿分子轨道的组成特征。

关键词: 三环己基锡配合物; 合成; 晶体结构; 量子化学

中图分类号: O614.53¹ 文献标识码: A 文章编号: 1001-4861(2011)10-1981-06

Synthesis, Crystal Structure and Quantum Chemistry of the Tricyclohexyltin Pyrrolidine Dithiocarbamate and Tricyclohexyltin Phthalimide Complexes

KUANG Dai-Zhi^{*1} JIANG Wu-Jiu^{1,2} FENG Yong-Lan¹ ZHANG Fu-Xing¹ WANG Jian-Qiu¹ YU Jiang-Xi¹

(¹Key Laboratory of Functional Organometallic Materials of Hengyang Normal University, College of Hunan Province, Department of Chemistry and Material Science, Hengyang Normal University, Hengyang, Hunan 421008, China)

(²Key Laboratory of Environmentally Friendly Chemistry and Applications, Ministry of Education, College of Chemistry, Xiangtan University, Xiangtan, Hunan 411105, China)

Abstract: The tricyclohexyltin pyrrolidine dithiocarbamate (**1**) and the tricyclohexyltin phthalimide complexes (**2**) have been synthesized via the reaction of the tricyclohexyltin hydroxide with the pyrrolidine dithiocarbamate and the phthalimide, respectively, and the structure has been characterized by IR, ¹H NMR spectra and elemental analysis. The crystal structure has been determined by X-ray diffraction. The crystal **1** belongs to orthorhombic space group $P2_12_12_1$ with $a=1.228\ 06(3)$ nm, $b=1.238\ 20(2)$ nm, $c=1.662\ 54(3)$ nm, $Z=4$, $V=2.528\ 03(9)$ nm³, $D_c=1.351$ g·cm⁻³, $\mu(\text{Mo } K\alpha)=1.184$ mm⁻¹, $F(000)=1\ 072$, $R_1=0.048\ 7$, $wR_2=0.121\ 0$. The crystal **2** belongs to orthorhombic space group $P2_12_12_1$ with $a=1.244\ 70(19)$ nm, $b=1.269\ 45(19)$ nm, $c=1.587\ 7(2)$ nm, $Z=4$, $V=2.508\ 7(6)$ nm³, $D_c=1.362$ g·cm⁻³, $\mu(\text{Mo } K\alpha)=1.039$ mm⁻¹, $F(000)=1\ 064$, $R_1=0.049\ 9$, $wR_2=0.128\ 4$. The tin atoms have a distorted tetrahedral coordination geometry. The study on two complexes have been performed with quantum chemistry calculation. The stabilities, some frontier molecular orbital energies and composition characteristics of some frontier molecular orbital of the complex have been investigated. CCDC: 809061, **1**; 809064, **2**.

Key words: tricyclohexyltin complex; synthesis; crystal structure; quantum chemistry

收稿日期: 2011-04-06。收修改稿日期: 2011-08-04。

湖南省自然科学基金(No.11JJ3021), 湖南省教育厅创新平台开放基金(No.09K099、No.10K010)和重点项目(No.10A014), 湖南省科技计划(No.2010JT4041)和衡阳市科技发展计划(No.2009KG52)资助项目。

*通讯联系人。E-mail: hnkdz@yahoo.com.cn

有机锡化合物因具有生物活性及多变的结构特征引起了人们广泛的关注^[1-12]。实验证明,有机锡化合物中心锡原子的配位形式不仅与烃基的结构有关,还与配体的类型有关,尤其是大阻位烃基和含有氮、硫等杂原子配体对有机锡化合物结构影响更明显,导致一些新型结构有机锡化合物的产生^[9-12]。在我们的前期研究中也证明了这一结论^[13-17]。

为了较系统地探讨大位阻基团的空间效应对反应活性的影响,本文利用空间位阻较大的三环己基氢氧化锡,与含硫、氮配体反应,合成了三环己基锡吡咯啉二硫代氨基甲酸酯(**1**)和三环己基锡邻苯二甲酰亚胺配合物(**2**),通过元素分析、红外光谱、核磁共振氢谱进行了表征,用 X-射线单晶衍射测定了化合物的晶体结构,并对化合物进行了量子化学从头计算,探讨了化合物的稳定性、分子轨道能量以及前沿分子轨道的组成特征。

1 实验部分

1.1 仪器和试剂

三环己基氢氧化锡、吡咯啉二硫代氨基甲酸钠、邻苯二甲酰亚胺均为化学纯。IR(KBr)用日本岛津 FTIR-8700 红外光谱仪(4 000~400 cm^{-1})测定。元素分析用 PE-2400(II)元素分析仪测定。晶体结构用 Bruker SMART APEX II CCD 单晶衍射仪测定。核磁共振氢谱用 AVANCE-400 核磁共振仪测定。熔点用北京产 XT-4 双目体视显微熔点测定仪测定(温度计未经校正)。

1.2 化合物的合成

1.2.1 化合物 **1** 的合成

在 50 mL 圆底烧瓶中,加入 0.385 g(1 mmol)三环己基氢氧化锡、0.169 g(1 mmol)吡咯啉二硫代氨基甲酸钠,25 mL 甲醇,反应 6 h,旋转蒸发去除溶剂,粗产品用无水甲醇重结晶,得无色晶体 0.314 g,产率 61.1%。熔点:156~157 $^{\circ}\text{C}$ 。元素分析实测值(按

$\text{C}_{25}\text{H}_{41}\text{NS}_2\text{Sn}$ 计算值, %):C 53.62 (53.70),H 8.17 (8.03),N 2.88(2.72)。IR (KBr, cm^{-1}):2 914.2,2 842.9 (s, $\nu_{\text{C-H}}$),1 440.7(s, $\nu_{\text{C-N}}$),1 164.9(m, $\nu_{\text{C-N-C}}$),989.4(m, $\nu_{\text{C-S}}$),455.2(w, $\nu_{\text{Sn-S}}$),418.5(m, $\nu_{\text{Sn-C}}$)。 ^1H NMR(CDCl_3 , 400 MHz), δ_{H} : 1.29~2.03 (m, 33H, cyclohexyl-H), 1.94~2.03 (m, 4H, CH_2), 3.79(s, 4H, N- CH_2)。

1.2.2 化合物 **2** 的合成

化合物 **2** 类似于 **1** 的合成,用 0.147 g(1 mmol)邻苯二甲酰亚胺替代化合物 **1** 的合成中的吡咯啉二硫代氨基甲酸钠,于 20 mL 甲醇中反应 8 h,冷却,过滤,静置数天,析出淡黄色晶体 0.432 g,产率 84.0%。熔点:176~177 $^{\circ}\text{C}$ 。元素分析实测值(按 $\text{C}_{26}\text{H}_{37}\text{NO}_2\text{Sn}$ 计算值, %):C 60.49 (60.72),H 7.17 (7.25),N 2.77(2.72)。IR (KBr, cm^{-1}):2 918.1,2 844.8(s, $\nu_{\text{C-H}}$),1 683.7(vs, $\nu_{\text{C=O}}$),1 298.0(s, $\nu_{\text{C-N}}$),1 103.2(m, $\nu_{\text{C-C}_2}$),727.1(m, $\nu_{\text{Ar-H}}$),536.2(w, $\nu_{\text{Sn-N}}$),418.5(w, $\nu_{\text{Sn-C}}$)。 ^1H NMR(CDCl_3 , 400 MHz), δ_{H} : 1.34~2.20 (m, 33H, cyclohexyl-H), 7.65~7.77(m, 4H, Ar-H)。

1.3 晶体结构测定

分别选取化合物 **1** 大小为 0.23 mm×0.21 mm×0.18 mm 和化合物 **2** 为 0.22 mm×0.19 mm×0.18 mm 的晶体,在 Bruker SMART APEX II CCD 单晶衍射仪上,采用经石墨单色化的 Mo $K\alpha$ 射线($\lambda=0.071\ 073$ nm),于 296(2) K,以 φ - ω 扫描方式收集衍射数据。可观察衍射点($I>2\sigma(I)$)用于结构分析和精修。全部数据经 L_p 因子和经验吸收校正。晶体结构由直接法解出,全部非氢原子坐标在差值 Fourier 合成中陆续确定,理论加氢法给出氢原子在晶胞中的位置坐标。对氢原子和非氢原子分别采用各向同性和各向异性热参数进行全矩阵最小二乘法修正,全部结构分析计算工作采用 SHELX-97 程序系统完成。晶体学数据见表 1。

CCDC:809061, **1**;809064, **2**。

表 1 化合物的晶体学数据

Table 1 Crystallographic data of the title complexes

Complexes	1	2
Empirical formula	$\text{C}_{25}\text{H}_{41}\text{NS}_2\text{Sn}$	$\text{C}_{26}\text{H}_{34}\text{NO}_2\text{Sn}$
Formula weight	514.38	514.26
Crystal system	Orthorhombic	Orthorhombic
Space group	$P2_12_12_1$	$P2_12_12_1$
a / nm	1.228 06(3)	1.244 70(19)
b / nm	1.238 20(2)	1.269 45(19)

续表 1

c / nm	1.662 54(3)	1.587 7(2)
Volume / nm^3	2.528 03(9)	2.508 7(6)
Z	4	4
$D_c / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	1.351	1.362
Absorption coefficient / mm^{-1}	1.184	1.039
$F(000)$	1072	1064
θ range / $(^\circ)$	2.05~27.47	2.05~27.50
Limiting indices	$-10 \leq h \leq 15, -15 \leq k \leq 16, -21 \leq l \leq 21$	$-16 \leq h \leq 15, -16 \leq k \leq 10, -13 \leq l \leq 20$
Reflections collected / unique (R_{int})	23 675 / 5 765 (0.049 0)	12 930 / 5 613 (0.021 3)
Completeness to $\theta=27.47^\circ / \%$	100.00	99.20
Max. and min. transmission	0.797 6 and 0.797 6	0.819 2 and 0.819 2
Data / restraints / parameters	5 765 / 169 / 245	5 613 / 210 / 271
Goodness-of-fit on F^2	1.041	1.086
Final R indices [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1=0.048\ 7, wR_2=0.121\ 0$	$R_1=0.049\ 9, wR_2=0.128\ 4$
R indices (all data)	$R_1=0.088\ 1, wR_2=0.141\ 8$	$R_1=0.067\ 6, wR_2=0.140\ 3$
Absolute structure parameter	1.01(5)	0.47(5)
$\Delta\rho_{\text{max}} / (\text{e} \cdot \text{nm}^{-3})$	965	1 093
$\Delta\rho_{\text{min}} / (\text{e} \cdot \text{nm}^{-3})$	-496	-365

1.4 量子化学计算

利用 Gaussian98W^[23]程序,在 B3lyp/Lanl2dz 基组水平,按文献^[4]方法,对化合物进行量子化学研究。

2 结果与讨论

2.1 晶体结构描述

化合物的主要键长和键角数据列于表 2, 化合

物的分子结构见图 1、图 2。

由分子结构和键参数可知,化合物 **1** 和 **2** 分别由含 S 或含 N 配体与三环己基锡配合,中心锡与配位原子形成四面体结构。化合物(**1**)的 3 个 Sn-C 键的键长相差只有 0.004 nm,但其 Sn(1)-S(2)键长明显大于 Sn-C 键长,为 0.247 7 nm,与类似化合物的 Sn-S 键长相近^[18-20]。Sn(1)与 S(1)的距离达 0.313 5 nm,大

表 2 化合物的部分键长和键角

Table 2 Selected bond lengths (nm) and bond angles ($^\circ$)

1					
Sn(1)-C(13)	0.216 3(8)	Sn(1)-C(7)	0.217 3(6)	Sn(1)-C(19)	0.220 3(8)
Sn(1)-S(2)	0.247 7(2)	Sn(1)-S(1)	0.313 5	C(1)-S(1)	0.167 7(7)
C(1)-S(2)	0.174 5(7)	N(1)-C(1)	0.131 7(9)	N(1)-C(3)	0.146 9(9)
N(1)-C(6)	0.147 2(9)				
C(13)-Sn(1)-C(7)	118.7(3)	C(1)-N(1)-C(3)	126.5(6)	C(13)-Sn(1)-S(2)	114.5(2)
C(13)-Sn(1)-C(19)	103.2(4)	C(1)-N(1)-C(6)	121.6(6)	C(7)-Sn(1)-S(2)	116.1(3)
C(7)-Sn(1)-C(19)	103.1(3)	C(3)-N(1)-C(6)	111.9(6)	C(19)-Sn(1)-S(2)	96.7(4)
N(1)-C(1)-S(1)	123.2(6)	N(1)-C(1)-S(2)	115.4(5)	S(1)-C(1)-S(2)	121.4(4)
2					
Sn(1)-N(1)	0.213 0(5)	Sn(1)-C(13)	0.213 1(7)	Sn(1)-C(7)	0.216 1(6)
Sn(1)-C(1)	0.215 7(6)	N(1)-C(27)	0.138 5(8)	N(1)-C(20)	0.138 5(7)
N(1)-Sn(1)-C(13)	105.0(3)	C(13)-Sn(1)-C(1)	119.7(3)	C(27)-N(1)-Sn(1)	130.1(4)
N(1)-Sn(1)-C(7)	102.8(3)	C(7)-Sn(1)-C(1)	109.4(2)	C(20)-N(1)-Sn(1)	120.6(4)
N(1)-Sn(1)-C(1)	107.1(3)	C(13)-Sn(1)-C(7)	111.4(4)	C(27)-N(1)-C(20)	109.3(5)
N(1)-C(27)-C(26)	108.4(5)	O(1)-C(20)-N(1)	123.4(6)	O(2)-C(27)-C(26)	125.6(6)
N(1)-C(20)-C(21)	107.3(5)	O(2)-C(27)-N(1)	126.0(6)	O(1)-C(20)-C(21)	129.3(6)

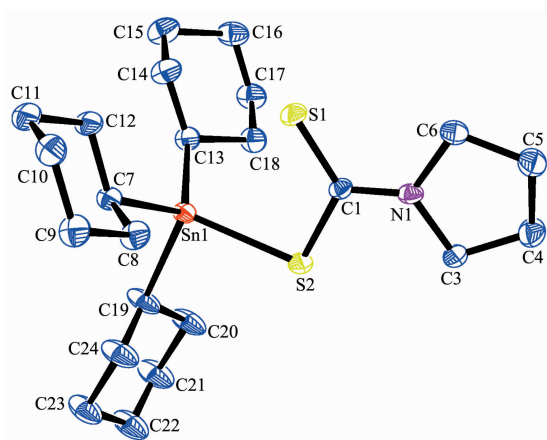


图 1 化合物 1 的分子结构图

Fig.1 Molecular structure of complex 1

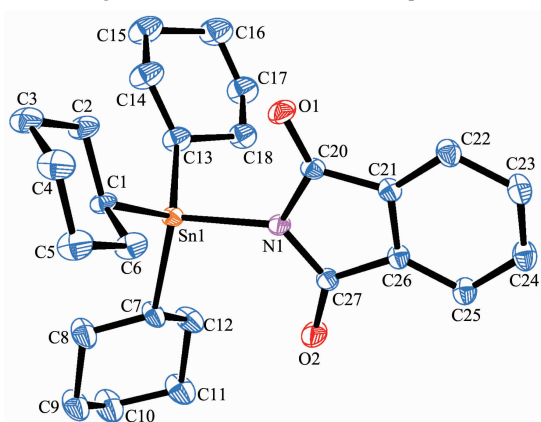


图 2 化合物 2 的分子结构图

Fig.2 Molecular structure of complex 2

于 Sn(1)和 S(1)原子的共价半径之和,可以认为它们之间作用很弱,配体是以单齿形式配位。化合物 2 的中心锡与配体原子的键长变化更小,3 个 Sn-C 键的键长相差只有 0.003 nm, 其中的 Sn (1)-N (1)为

0.213 0(5) nm,接近 Sn-C 键长,比类似化合物^[21-22]的 Sn-N 键长明显变短 0.004~0.01 nm,且从键角 C(13)-Sn (1)-N (1)为 105.0 (3)°、键角 C (7)-Sn (1)-N (1)为 102.8(3)°和键角 C(1)-Sn(1)-N(1)为 107.1(3)°看出, N(1)与 Sn(1)-C 的键角稍小于四面体的 109.5°,表明邻苯二甲酰亚胺与锡配位时,3 个环己基的位阻作用较小。因此,中心四面体构型畸变化合物 2 不如化合物 1 明显。

2.2 量子化学研究

2.2.1 前沿轨道能量

化合物 1: $E_T = -978.713\ 56\ \text{a.u.}$, $E_{\text{HOMO}} = -0.189\ 86\ \text{a.u.}$, $E_{\text{LUMO}} = -0.013\ 59\ \text{a.u.}$, $\Delta E_{\text{LUMO-HOMO}} = 0.176\ 27\ \text{a.u.}$; 化合物 2: $E_T = -1\ 220.882\ 67\ \text{a.u.}$, $E_{\text{HOMO}} = -0.221\ 95\ \text{a.u.}$, $E_{\text{LUMO}} = -0.075\ 04\ \text{a.u.}$, $\Delta E_{\text{LUMO-HOMO}} = 0.146\ 91\ \text{a.u.}$ 。从体系能量和前沿轨道的能量分析,2 个化合物总能量和占有轨道能量均较低,2 个配合物均较难失去电子,其基态较稳定。

2.2.2 轨道成分分析

将化合物 1 原子分为 5 个部分: C 原子、H 原子、N 原子、S 原子、Sn 原子。从轨道成分图 3 和前线轨道示意图 4 可知,在前沿轨道和其附近轨道成分有较明显变化。在化合物中,碳原子对 HOMO 的贡献 64.51%最大,其次是硫原子,对 HOMO 的贡献为 25.18%,其他原子对 HOMO 的贡献则相对较少,锡原子占 HOMO 成分 5.24%,氢原子 4.50%,氮原子 0.58%。在最低未占轨道中,碳原子对 LUMO 的贡献为 51.84%,硫原子对 LUMO 的贡献为 18.26%,氮原子 15.20%,锡原子 7.61%,氢原子 7.08%。比较 HOMO 与 LUMO 的各类原子轨道成份看出,当电子

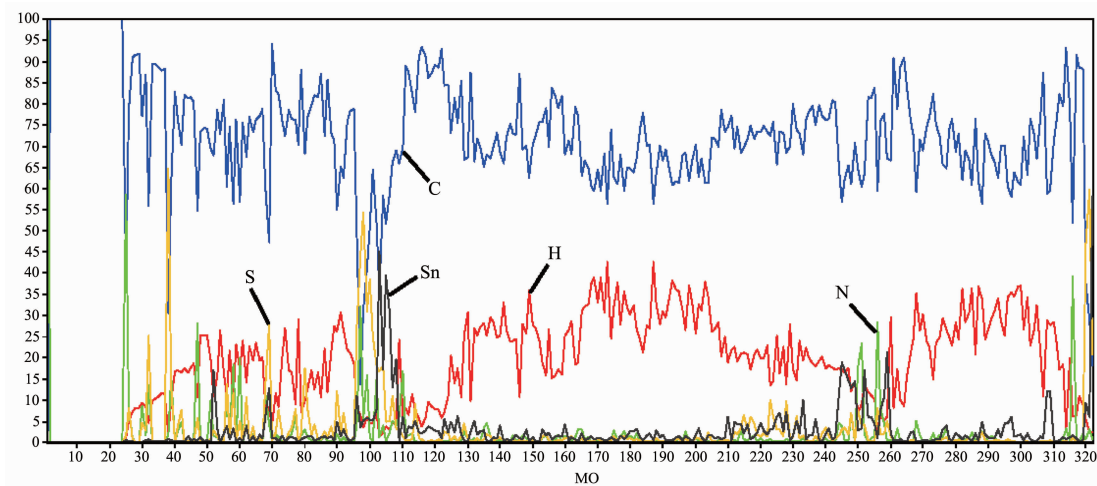


图 3 化合物 1 的分子轨道成分图

Fig.3 Molecular orbitals composition of the complex 1 at Lanl2dz level

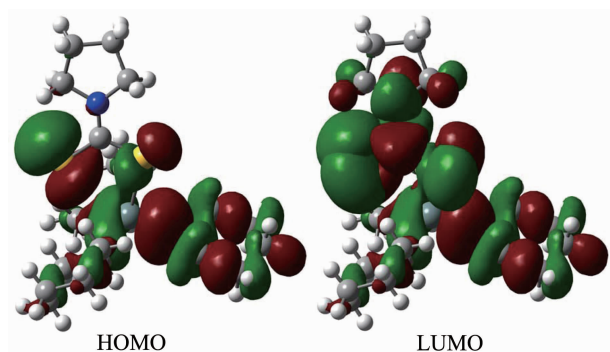


图 5 化合物 2 的分子轨道成分图

Fig.5 Molecular orbitals composition of the complex 2 at Lan12dz level

从 HOMO 激发到 LUMO 轨道时,主要是环己基碳原子和硫原子的电子向锡原子以及四氢吡咯环的氮原子和氢原子转移,其中锡原子既是电荷转移的

桥梁,又是电荷转移的受体。

将化合物 2 原子分为 5 个部分:C 原子、H 原子、O 原子、N 原子、Sn 原子。轨道成分图 5 和前线轨道示意图 6,在前沿轨道和其附近轨道成分有明显变化。其中碳原子对 HOMO 的贡献 81.49%最大,其次是锡原子,对 HOMO 的贡献为 11.87%,其他原子对 HOMO 的贡献则相对较少,氢原子占 HOMO 成分 5.98%,氧原子 0.28%,氮原子 0.37%。在最低未占轨道中,各原子对 LUMO 的贡献发生较为明显的变化,碳原子对 LUMO 的贡献 73.99%,氧原子对 LUMO 的贡献为 25.49%,氮原子 0.02%,锡原子 0.004%,氢原子 0.50%。从 HOMO 和 LUMO 的各类原子轨道成份分析,当电子从 HOMO 激发到 LUMO 轨道时,主要是环己基碳原子和锡原子的电子向邻苯二甲酰亚胺环上的碳原子和氧原子转移。

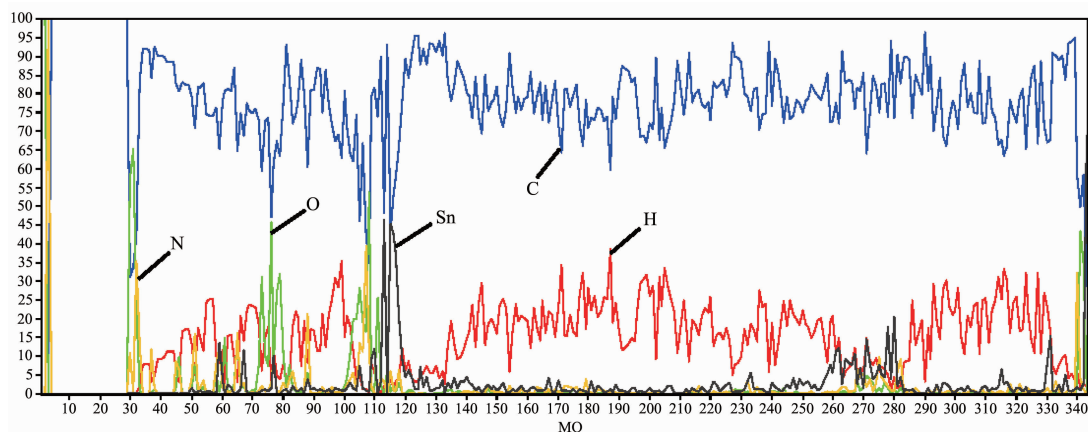


图 5 化合物 2 的分子轨道成分图

Fig.5 Molecular orbitals composition of the complex 2 at Lan12dz level

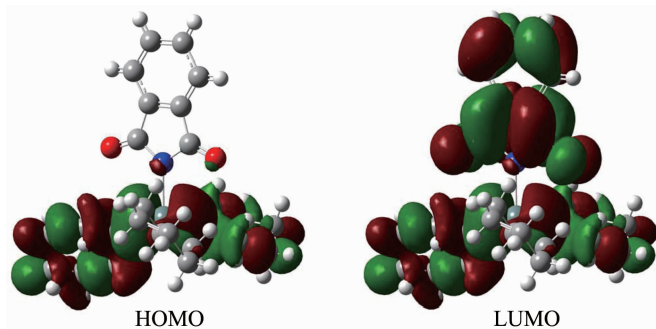


图 6 化合物 2 的前沿分子轨道示意图

Fig.6 Schematic diagram of frontier MO for the complex 2

参考文献:

- [1] ZHANG Fu-Xing(张复兴), WANG Jian-Qiu(王剑秋), KUANG Dai-Zhi(邝代治), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.(Wuji Huaxue Xuebao)*, **2009**,**25**(2):213-217
- [2] ZHANG Fu-Xing(张复兴), WANG Jian-Qiu(王剑秋), KUANG

- Dai-Zhi(邝代治), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.(Wuji Huaxue Xuebao)*, **2009**,**25**(10):1812-1817
- [3] YU Jiang-Xi(庾江喜), KUANG Dai-Zhi(邝代治), YIN Du-Lin(尹笃林), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.(Wuji Huaxue Xuebao)*, **2010**,**26**(8):1507-1510
- [4] KUANG Dai-Zhi(邝代治), FENG Yong-Lan(冯泳兰), ZHANG

- Fu-Xing(张复兴), et al. *Chinese J. Inorg. Chem. (Wuji Huaxue Xuebao)*, **2010**, **26**(12):2160-2164
- [5] Ma C L, Ren Y, Wang Y R, et al. *Polyhedron*, **2010**, **29**:881-885
- [6] Li W, Du D F, Liu S S, et al. *J. Organomet. Chem.*, **2010**, **695**:2153-2159
- [7] Ruan B F, Tian Y P, Zhou H P, et al. *Inorg. Chim. Acta*, **2011**, **365**:302-308
- [8] Yin H D, Li J, Hong M, et al. *J. Mol. Struct.*, **2011**, **985**:261-269
- [9] Chandrasekhar V, Thirumoorathi R, Metre R K, et al. *J. Organomet. Chem.*, **2011**, **696**:600-606
- [10] Affan M A, Salam M A, Ahmad Fasihuddin B, et al. *Inorg. Chim. Acta*, **2010**, **366**:227-232
- [11] López T E, Medina-Castillo A L, Fernández-Sánchez J F, et al. *J. Organomet. Chem.*, **2010**, **695**:2305-2310
- [12] Švec P, Padělková Z, Růžička A, et al. *J. Organomet. Chem.*, **2010**, **696**:676-686
- [13] CHEN Zhi-Min(陈志敏), ZHANG Fu-Xing(张复兴), WANG Jian-Qiu(王剑秋), et al. *Chinese J. Inorg. Chem. (Wuji Huaxue Xuebao)*, **2006**, **22**(3):498-502
- [14] ZHANG Fu-Xing(张复兴), KUANG Dai-Zhi(邝代治), WANG Jian-Qiu(王剑秋), et al. *Chinese J. Inorg. Chem. (Wuji Huaxue Xuebao)*, **2006**, **22**(7):1321-1326
- [15] KUANG Dai-Zhi(邝代治), ZHANG Fu-Xing(张复兴), FENG Yong-Lan(冯泳兰), et al. *Chinese J. Struct. Chem. (Jiegou Huaxue)*, **2008**, **27**(12):1514-1518
- [16] KUANG Dai-Zhi(邝代治), JIANG Jiang-Ping(蒋江平), ZHANG Fu-Xing(张复兴), et al. *Chinese J. Struct. Chem. (Jiegou Huaxue)*, **2008**, **27**(2):220-224
- [17] KUANG Dai-Zhi(邝代治), YU Jiang-Xi(庾江喜), YIN Du-Lin(尹笃林), et al. *Chinese J. Inorg. Chem. (Wuji Huaxue Xuebao)*, **2010**, **26**(12):2303-2306
- [18] YIN Han-Dong(尹汉东), WANG Chuan-Hua(王传华), MA Chun-Lin(马春林), et al. *Chinese J. Org. Chem. (Youji Huaxue)*, **2002**, **22**(10):797-800
- [19] YIN Han-Dong(尹汉东), WANG Chuan-Hua(王传华), MA Chun-Lin(马春林). *Chinese J. Inorg. Chem. (Wuji Huaxue Xuebao)*, **2003**, **19**(6):617-620
- [20] YIN Han-Dong(尹汉东), HONG Min(洪敏). *Chinese J. Inorg. Chem. (Wuji Huaxue Xuebao)*, **2004**, **20**(3):297-300
- [21] Chuprunov E V, Tarkhova T N, Korallova T Yu, et al. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR.*, **1978**, **242**(3):606-608
- [22] Chuprunov E V, Stolyarova N E, Shcherbakov V I, et al. *Zh. Strukt. Khim.*, **1987**, **28**(5):797-799
- [23] Aeleen F, Michael J F. *Gaussian 98 User's Reference*, Gaussian, Inc., Carnegie Office Park, Bldg. 6 Pittsburgh, PA15106 USA.