

1-苯基-3-甲基-4-苯甲酰基-5-吡唑啉酮镝(III) 配合物的晶体结构、磁性及理论分析

景佳慧^{#,1} 刘斌^{#,1} 孟银杉^{2,3} 张义权⁴ 陆海全¹ 刘珊珊^{*,1}

(¹北京石油化工学院化学工程学院,燃料清洁化及高效催化减排技术北京市重点实验室,北京 102617)

(²大连理工大学,精细化工国家重点实验室,大连 116024)

(³北京大学化学与分子工程学院,北京分子科学国家实验室,
稀土材料化学及应用国家重点实验室,北京 100871)

(⁴南京师范大学,江苏省大规模复杂系统数值模拟重点实验室,南京 210023)

摘要: 采用缓慢挥发法合成了一例单核镝配合物 $[\text{Dy}(\text{pmbp})_3(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{CH}_3\text{CN}$ (**1**), (Hpmbp =1-苯基-3-甲基-4-苯甲酰基-5-吡唑啉酮)。单晶X射线衍射数据表明镝离子与3个 pmbp^- 配体和2个 H_2O 分子配位,形成八配位的扭曲四方反棱柱构型。磁性测试表明配合物**1**在加场下可以表现出慢的磁弛豫行为,其有效能垒为42 K。通过理论计算得出了配合物**1**的磁易轴方向,并解释了其磁学性能。磁构关系研究分析了 pmbp^- 配体的共轭效应对配合物**1**磁各向异性的影响。

关键词: β -二酮; 单分子磁体; 磁各向异性; 共轭效应

中图分类号: O614.342

文献标识码: A

文章编号: 1001-4861(2021)04-0623-06

DOI: 10.11862/CJIC.2021.082

Crystal Structure, Magnetic Properties and Theoretical Investigation of a Dysprosium Complex Based on 1-Phenyl-3-methyl-4-benzoyl-pyrazol-5-one

JING Jia-Hui^{#,1} LIU Bin^{#,1} MENG Yin-Shan^{2,3} ZHANG Yi-Quan⁴ LU Hai-Quan¹ LIU Shan-Shan^{*,1}

(¹Beijing Key Laboratory of Fuels Cleaning and Advanced Catalytic Emission Reduction Technology,
College of Chemical Engineering, Beijing Institute of Petrochemical Technology, Beijing 102617, China)

(²State Key Laboratory of Fine Chemicals, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning 116024, China)

(³Beijing National Laboratory for Molecular Sciences, Beijing Key Laboratory for Magnetoelectric Materials and Devices,
College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, China)

(⁴Jiangsu Key Laboratory for NSLSCS, School of Physical Science and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

Abstract: A mononuclear dysprosium complex $[\text{Dy}(\text{pmbp})_3(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{CH}_3\text{CN}$ (**1**) (Hpmbp =1-phenyl-3-methyl-4-benzoyl-pyrazol-5-one) was synthesized by the slow evaporation method. The complex exhibits a distorted square antiprism geometry around Dy(III) ion, which coordinates to three pmbp^- and two H_2O ligands. The magnetic properties measurements show that **1** can exhibit a slow magnetic relaxation behavior under an applied dc field, and the effective energy barrier was 42 K. The *ab initio* calculations point out that the magnetic easy axis is along the direction of two pmbp^- ligands in *trans* position, and the g_z value of low-lying ground state was 18.818. Magneto-structural correlation studies analyzed the influence of conjugation effect in pmbp^- ligand on the magnetic anisotropy of complex **1**.
CCDC: 2032517.

Keywords: β -diketone; single-molecule magnet; magnetic anisotropy; conjugation effect

收稿日期: 2020-09-20。收修改稿日期: 2020-12-19。

北京市自然科学基金(No.2202016)和国家自然科学基金(No.21602013)资助。

[#]共同第一作者。

*通信联系人。E-mail: liushanshan2015@bipt.edu.cn

0 引言

信息技术的快速发展对存储材料的体积、存储密度等提出了更高的要求。单分子磁体可以单个分子为磁记忆单元,有望应用于高密度磁存储器等领域。近年来单分子磁体的研究已经取得了重要突破,磁阻塞温度可达到 80 K^[1]。提高单分子磁体的磁阻塞温度为该领域不断追求的目标,而多项实验研究和理论分析指出了设计性能优异单分子磁体的策略^[2-12],如高对称性、直线型二配位的镧配合物^[1,4,13-15]。同时,研究表明镧配合物的磁各向异性与配位环境中负电荷密度的分布情况密切相关^[16]。配位空间中负电荷密度分布呈轴向性时,该镧配合物将会表现出更强的磁各向异性,而配体所连基团的电子效应会影响负电荷密度的分布。由此可见,电子效应对磁各向异性影响的研究具有重要意义。

在已报道的单分子磁体类型中,氧基配体构筑的稀土配合物种类丰富,如 β -二酮类配体、醇类配体、烷氧基类配体等^[17-19],其中 β -二酮类配体应用广泛,如乙酰丙酮、二苯甲酰甲烷、丁二酮、庚二酮及其衍生物等^[20-23]。此外,吡啶啉酮类 β -二酮配体已被广泛应用在金属离子分离领域、发光领域和生物活性领域^[24-26]。我们以 1-苯基-3-甲基-4-苯甲酰基-5-吡啶啉酮(Hpmbp)配体构筑了一例单核镧配合物 $[\text{Dy}(\text{pmbp})_3(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{CH}_3\text{CN}$ (**1**),表征了该配合物的单分子磁体性能,通过理论计算分析了其磁易轴方向并研究了 pmbp⁻配体中共轭效应对磁各向异性的影响。

1 实验部分

1.1 主要试剂与仪器

本实验所涉及操作在空气氛围中完成,所用试

剂均未经纯化直接使用。元素分析测试在 Elementar Vario EL CUBE(德国)元素分析仪完成。粉末 X 射线衍射数据在 Rigaku(日本理学)DMAX 粉末 X 射线衍射仪上使用 Cu K α ($\lambda=0.154\ 06\ \text{nm}$) 在 40 kV 和 40 mA 下获得,扫描范围为 5°~50°。样品的直流磁性数据和交流磁性数据测试分别在 Quantum Design MPMS-XL-7 磁测量仪和 PPMS-9 上进行。

利用 MOLCAS 8.4 程序包^[27]和 SINGLE_ANISO 程序^[28-30]进行 CASSCF 计算得到了能级、 g 张量、 m_j 值和磁轴等信息。

1.2 配合物 $[\text{Dy}(\text{pmbp})_3(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{CH}_3\text{CN}$ (**1**)的合成

称取 Hpmbp 0.843 2 g 和氢氧化钠 0.152 8 g 于 50 mL 蒸馏水中,加热搅拌溶解,趁热过滤,将滤液缓慢滴入 0.439 2 g $\text{Dy}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 的 100 mL 蒸馏水溶液中,产生浅黄色的粉末。再加入 100 mL 蒸馏水,抽滤,水洗 3 次,无水乙醇洗 1 次,将粉末在 80 °C 下干燥 1.5 h,得粉末 0.812 9 g。称取 0.199 2 g 粉末溶于 5 mL 乙腈和 5 mL 丙酮溶液中进行重结晶,过滤,静置培养单晶,几天后得到黄色晶体,产率 43.2%。元素分析按 $\text{C}_{53}\text{H}_{46}\text{DyN}_7\text{O}_8$ 计算的理论值(%):C 59.41, H 4.33, N 9.15;实验值(%):C 59.17, H 4.28, N 9.10。

1.3 配合物的晶体结构测定

选取大小为 0.41 mm×0.05 mm×0.04 mm 的单晶置于安捷伦 SuperNova Dual Atlas CCD 单晶衍射仪上,采用 Mo K α ($\lambda=0.071\ 073\ \text{nm}$)射线作为光源,在 180(2) K 下收集衍射数据。结构使用 SHELXL 解析^[31],水上的氢原子由差值傅里叶合成图得到,其他氢原子由理论加氢得到。配合物 **1** 的晶体学数据列于表 1,主要键长和键角列于表 2。

CCDC:2032517。

表 1 配合物 **1** 的晶体学数据

Table 1 Crystal data and structure refinement for complex **1**

Formula	$\text{C}_{53}\text{H}_{46}\text{DyN}_7\text{O}_8$	Z	4
Formula weight	1 071.47	$F(000)$	2 172.0
Crystal system	Monoclinic	μ / mm^{-1}	1.665
Space group	$P2_1/n$	Reflection collected	17 816
a / nm	0.998 84(4)	Goodness-of-fit on F^2	1.173
b / nm	0.996 82(6)	Unique reflection	8 051
c / nm	4.709 1(2)	R_{int}	0.049 4
$\beta / (^\circ)$	95.113(4)	$R_1, wR_2 [I \geq 2\sigma(I)]$	0.056 4, 0.068 0
V / nm^3	4.670 0(4)	R_1, wR_2 (all data)	0.086 1, 0.073 8

表2 配合物1的部分键长(nm)和键角(°)

Table 2 Selected bond lengths (nm) and angles (°) for complex 1

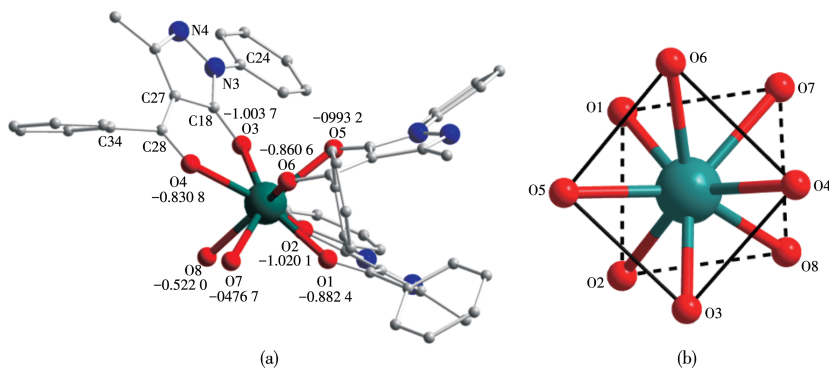
Dy1—O1	0.231 7(3)	Dy1—O2	0.231 2(3)	Dy1—O3	0.230 1(3)
Dy1—O4	0.241 1(3)	Dy1—O5	0.232 4(3)	Dy1—O6	0.243 7(4)
Dy1—O7	0.246 1(3)	Dy1—O8	0.237 6(3)		
O1—Dy1—O2	73.81(13)	O3—Dy1—O4	73.78(11)	O5—Dy1—O6	73.46(12)
O7—Dy1—O8	71.90(11)				

2 结果与讨论

2.1 配合物1的晶体结构

X射线单晶衍射数据(表1)表明配合物1结晶于单斜晶系 $P2_1/n$ 空间群。如图1所示,Dy(III)离子与3个pmbp⁻配体和2个H₂O分子配位。此外,还有一分子乙腈未参与配位。Dy(III)离子为[DyO₈]型八配位构型,其中6个O原子来自3个pmbp⁻配体,2个O原子来自2个H₂O分子。Dy—O(pmbp⁻)平均键长(0.235 1 nm)明显短于Dy—O(H₂O)平均键长(0.241 9 nm)。在配合物结构中,2个H₂O分子相邻,2个pmbp⁻配体处于对位,另一个pmbp⁻配体与2个H₂O分子处于对位。O7—Dy1—O8键角为71.90(11)°,

pmbp⁻中2个O原子与Dy(III)的键角分别为73.81(13)°、73.78(11)°和73.46(12)°。以其中一个配位的pmbp⁻配体为例,分析pmbp⁻内的电子共轭效应。C34所在的苯环与螯合六元环和吡啶环的二面角为52.478°和65.778°,接近于垂直关系,且C34—C28键长为0.150 7 nm,与C—C单键键长相符,表明苯环与螯合六元环和吡啶环未形成共轭;吡啶环与C24所在苯环的二面角为24.001°,具有一定程度的共轭,该部分结构特点与[La(pmbp)₃(H₂O)₂]₂、[Sm(pmbp)₃(H₂O)₂]相似^[32-33]。用SHAPE程序^[34]计算得出配合物1中Dy(III)离子的配位环境接近于四方反棱柱构型(偏离度0.731)。相邻Dy(III)离子之间的最短距离为0.996 8 nm。



Dy: teal, O: red, N: blue, C: gray; Acetonitrile and hydrogen atoms are omitted for clarity

图1 配合物1的结构及O1~O8的Mulliken电荷(a)和Dy(III)离子的配位环境(b)

Fig.1 Structure of complex 1 and Mulliken charges of O1~O8 (a) and coordination environment of Dy(III) ion (b)

2.2 配合物1的粉末衍射测试

在室温下对配合物1进行了粉末X射线衍射测

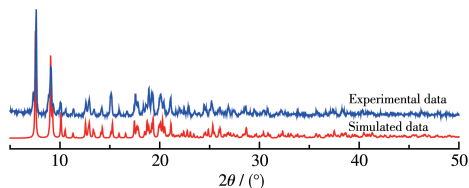


图2 配合物1的粉末X射线衍射图

Fig.2 Powder X-ray diffraction pattern of complex 1

试。如图2所示,实验数据与由单晶结构数据模拟所得数据相符,表明样品纯度符合后续测试要求。

2.3 配合物1的磁性

我们测量了配合物1在4~300 K的温度范围内及1 kOe外加磁场中的变温磁化率。如图3所示,在300 K时配合物1的 $\chi_M T$ 值为13.90 emu·K·mol⁻¹,接近于一个自由Dy(III)离子的理论值14.17 emu·K·mol⁻¹。随着温度的降低, $\chi_M T$ 值平缓下降;当温度达到4 K时, $\chi_M T$ 值降到最小值:10.98 emu·K·mol⁻¹,这

可归因于 Stark 能级的退占据。在 0~50 kOe 的磁场范围内,在 2 K 下测量了配合物 **1** 的饱和磁化强度曲线(图 4a),其最大值为 $4.99N\beta$, 低于理论值 $10N\beta$ 。同时,不同温度(2、3、5、8、10 K)下的磁化强度曲线(图 4b)不能重叠,表明配合物 **1** 存在磁各向异性。

为研究配合物 **1** 的磁弛豫行为,对其进行了 2~10 K 温度区间的交流磁化率随频率(100~10 000 Hz)的测量。在零场下可以观察到虚部交流磁化率信号,但是并没观察到 χ'' 的峰值,表明存在强的量子隧穿(QTM)效应(图 5a)。在 2 kOe 外加磁场下, QTM 效应被抑制,可以观察到 χ'' 峰值(图 5b)。随着温度的升高, χ'' 峰逐渐向高频方向移动,表明存在慢的磁弛豫行为。以 Arrhenius 公式 $\tau = \tau_0 \exp[\Delta E / (k_B T)]$ 对 $\ln \tau - T^{-1}$ 图(图 6)进行有效能垒拟合,得出了配合物 **1** 在 2 kOe 直流场下的能垒为 42 K,指前因子 $\tau_0 = 2.07 \times$

10^{-7} s。

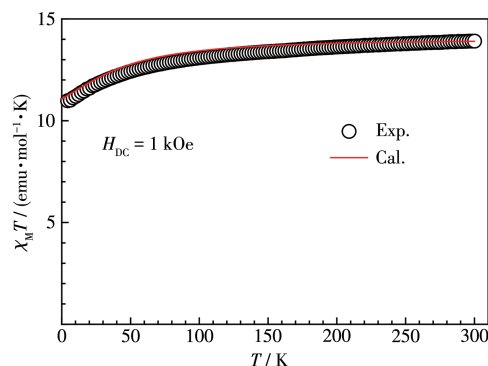


图3 配合物 **1** 的变温磁化率曲线: 实验测量(黑色)和从头计算(红色)

Fig.3 Temperature-dependent magnetic susceptibility of complex **1** by experimental measurements (black) and *ab initio* calculations (red)

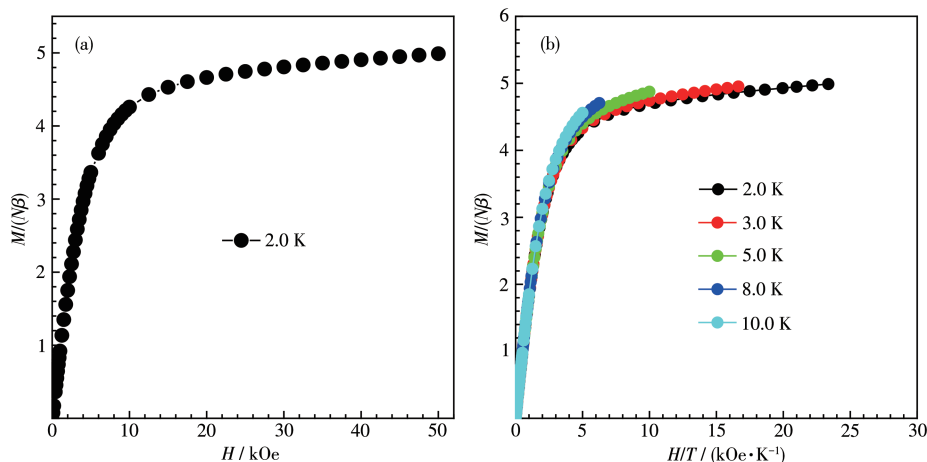


图4 配合物 **1** 在 2 K 下的磁化强度随磁场变化曲线 (a) 和 $M-H/T$ 曲线 (b)

Fig.4 Magnetic field dependence of magnetization at 2 K (a) and $M-H/T$ plots (b) for complex **1**

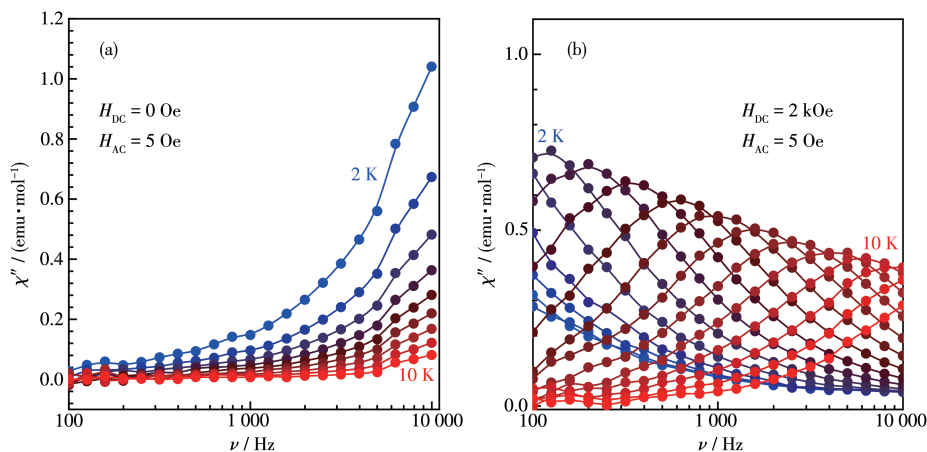


图5 配合物 **1** 在零直流场下的虚部交流磁化率曲线 (a) 和在外加 2 kOe 直流场下的虚部交流磁化率曲线 (b)

Fig.5 Frequency dependence of χ'' ac susceptibilities in the absence of dc field (a) and under a 2 kOe dc field (b) for complex **1**

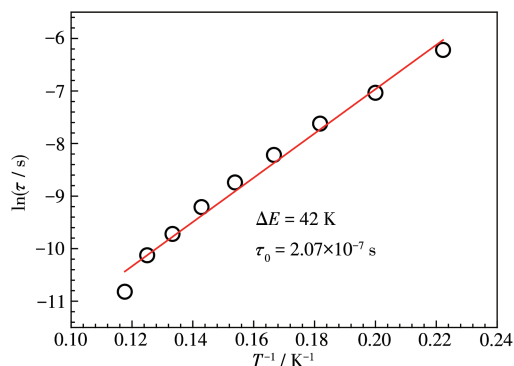


图6 配合物1的有效能垒拟合图

Fig.6 Effective energy barrier plot of complex 1

2.4 理论分析

为了进一步研究配合物1的磁各向异性和微观电子能级态的组成,我们利用MOLCAS 8.4软件的CASSCF/RASSI-SO/SINGLE_ANISO程序^[27]对配合物1进行从头计算。磁性测量和理论计算得到的变温磁化率曲线,可以很好地吻合(图3)。表3为配合物1的微观电子能级8个KDs和对应的 $g(g_x, g_y, g_z)$ 。基态 g_z 值为18.818,严重偏离Dy(III)离子的Ising极限值20; g_x 和 g_y 值的大小与横向磁各向异性相关,理论研究认为 $g_x, g_y > 0.015$ 的情况下,配合物不容易在零场下表现出慢的磁弛豫行为^[16],而配合物1的基态微观电子能级的 g_x 和 g_y 值远大于该值。同时,微观电子能级基态横向磁矩($0.067\mu_B$)较大,表明存在强的QTM过程。以上均导致配合物1在零场下难以表现出明显的慢磁弛豫行为。此外,基态波函数中 $|\pm 15/2\rangle$ 仅占84.33%,也说明了这一问题。

理论计算所得微观电子能级基态磁各向异性轴沿着2个pmbp⁻配体方向(图7),与Dy—O3和Dy—O4的夹角为35.442°和38.604°,近似处于pmbp⁻配体2个O原子中间位置。在配合物1的结构中,其中

表3 配合物1的八个最低态的 g 值Table 3 g values for eight low-lying states of complex 1

Low-lying state	g_x	g_y	g_z
1	0.117	0.287	18.818
2	1.565	3.047	13.482
3	7.043	6.227	4.882
4	0.186	0.727	13.810
5	0.427	0.751	14.302
6	0.503	0.616	13.064
7	0.218	0.662	17.649
8	0.002	0.004	19.724

2个pmbp⁻配体处于对位,另一个pmbp⁻配体与2分子水处于对位。理论计算得出O1~O8的Mulliken电荷如图1a所示,由此可见沿着2个对位pmbp⁻配体方向的负电荷密度更集中,相应的静电势更强,因而磁易轴沿着该方向更稳定。

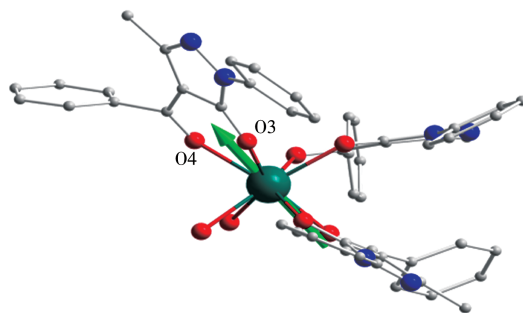


图7 配合物1的磁易轴方向

Fig.7 Orientation of magnetic easy axis of complex 1

由磁性表征结果及理论计算可知该配合物磁各向异性并不强,这与其结构密切相关。分析其结构可知,配体pmbp⁻中螯合六元环与吡唑环及相连苯环存在一定程度的共轭效应,电子的离域导致配位氧原子上的负电荷分散至吡唑环及相连苯环。磁易轴方向2个pmbp⁻配体的负电荷离域不利于 $|\pm 15/2\rangle$ 态的稳定,因此难以构筑强的磁各向异性。

3 结论

我们以 β -二酮配体1-苯基-3-甲基-4-苯甲酰基-5-吡唑啉酮合成了一例单核稀土配合物[Dy(pmbp)₃(H₂O)₂]·CH₃CN,并对其进行了元素分析、单晶X射线衍射及磁性表征。Dy(III)离子处于畸变的四方反棱柱配位环境中。该配合物在2 kOe的外加磁场下可以表现出慢的磁弛豫行为,为一例场诱导单分子磁体,其能垒为42 K, $\tau_0 = 2.07 \times 10^{-7}$ s。理论计算得出其磁易轴方向沿着对位的2个pmbp⁻配体。同时,微观电子能级 g 值及基态横向磁矩大小解释了该配合物在零场下难以表现出慢的磁弛豫行为的现象,磁构关系分析表明这与pmbp⁻配体中的共轭效应相关。

参考文献:

- [1] Guo F S, Day B M, Chen Y C, Tong M L, Mansikkamäki A, Layfield R A. *Science*, **2018**, *362*(6421):1400-1403
- [2] Rinehart J D, Long J R. *Chem. Sci.*, **2011**, *2*(11):2078-2085
- [3] Wu H P, Li M, Yin B, Xia Z Q, Ke H S, Wei Q, Xie G, Chen S P, Gao

- S L. *Dalton Trans.*, **2019**,**48**(43):16384-16394
- [4] Ungur L, Chibotaru L F. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2011**,**13**(45): 20086-20090
- [5] Blagg R J, Ungur L, Tuna F, Speak J, Comar P, Collison D, Wernsdorfer W, McInnes E J L, Chibotaru L F, Winpenny R E P. *Nat. Chem.*, **2013**,**5**(8):673-678
- [6] Chilton N F, Goodwin C A P, Mills D P, Winpenny R E P. *Chem. Commun.*, **2015**,**51**(1):101-103
- [7] Jiang Z J, Sun L, Yang Q, Yin B, Ke H S, Han J, Wei Q, Xie G, Chen S P. *J. Mater. Chem. C*, **2018**,**6**(15):4273-4280
- [8] McClain K R, Gould C A, Chakarawet K, Teat S J, Groshens T J, Long J R, Harvey B G. *Chem. Sci.*, **2018**,**9**(45):8492-8503
- [9] Liu J L, Chen Y C, Tong M L. *Chem. Soc. Rev.*, **2018**,**47**(7):2431-2453
- [10] Meng Y S, Jiang S D, Wang B W, Gao S. *Acc. Chem. Res.*, **2016**,**49**(11):2381-2389
- [11] Jiang S D, Qin S X. *Inorg. Chem. Front.*, **2015**,**2**(7):613-619
- [12] Ungur L, Chibotaru L F. *Chem. Eur. J.*, **2017**,**23**(15):3708-3718
- [13] Goodwin C A P, Ortu F, Reta D, Chilton N F, Mills D P. *Nature*, **2017**,**548**(7668):439-442
- [14] Guo F S, Day B M, Chen Y C, Tong M L, Mansikkamäki A, Layfield R A. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**,**56**(38):11445-11449
- [15] Evans P, Reta D, Whitehead G F S, Chilton N F, Mills D P. *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**,**141**(50):19935-19940
- [16] Aravena D, Ruiz E. *Inorg. Chem.*, **2013**,**52**(23):13770-13778
- [17] Woodruff D N, Winpenny R E P, Layfield R A. *Chem. Rev.*, **2013**,**113**(7):5110-5148
- [18] Zhang P, Guo Y N, Tang J K. *Coord. Chem. Rev.*, **2013**,**257**(11/12): 1728-1763
- [19] Feltham H L C, Brooker S. *Coord. Chem. Rev.*, **2014**,**276**:1-33
- [20] Jiang S D, Wang B W, Su G, Wang Z M, Gao S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2010**,**49**(41):7448-7451
- [21] Dong Y P, Yan P F, Zou X Y, Li G M. *Inorg. Chem. Front.*, **2015**,**2**(9):827-836
- [22] 刘彩明, 黄光熙, 熊明. 无机化学学报, **2014**,**30**(1):93-98
LIU C M, HUANG G X, XIONG M. *Chinese J. Inorg. Chem.*, **2014**,**30**(1):93-98
- [23] 葛景园, 陈忠研, 马建平, 黄帅, 杜佳, 王海欧, 苏昆朋, 王海英. 无机化学学报, **2018**,**34**(9):1761-1767
Ge J Y, CHEN Z Y, MA J P, HUANG S, DU J, WANG H O, SU K P, WANG H Y. *Chinese J. Inorg. Chem.*, **2018**,**34**(9):1761-1767
- [24] 罗明润, 程立, 宋乐新, 张定荣. 无机化学学报, **1986**,**2**(2):39-48
LUO M R, CHENG L, SONG L X, ZHANG D R. *Chinese J. Inorg. Chem.*, **1986**,**2**(2):39-48
- [25] Zhou D J, Li Q, Huang C H, Yao G Q, Umetani S, Matsui M, Ying L M, Yu A C, Zhao X S. *Polyhedron*, **1997**,**16**(8):1381-1389
- [26] 何其庄, 马树芝, 许东芳. 无机化学学报, **2007**,**23**(10):1723-1728
HE Q Z, MA S Z, XU D F. *Chinese J. Inorg. Chem.*, **2007**,**23**(10): 1723-1728
- [27] Aquilante F, Autschbach J, Carlson R K, Chibotaru L F, Delcey M G, De Vico L, Galván I F, Ferré N, Frutos L M, Gagliardi L, Garavelli M, Giussani A, Hoyer C E, Li Manni G, Lischka H, Ma D, Malmqvist P A, Müller T, Nenov A, Olivucci M, Pedersen T B, Peng D, Plasser F, Pritchard B, Reiher M, Rivalta I, Schapiro I, Segarra-Martí J, Stenrup M, Truhlar D G, Ungur L, Valentini A, Vancollie S, Veryazov V, Vysotskiy V P, Weingart O, Zapata F, Lindh R. *J. Comput. Chem.*, **2016**,**37**(5):506-541
- [28] Chibotaru L F, Ungur L, Soncini A. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2008**,**47**(22):4126-4129
- [29] Ungur L, Van den Heuvel W, Chibotaru L F. *New J. Chem.*, **2009**,**33**(6):1224-1230
- [30] Chibotaru L F, Ungur L, Aronica C, Elmoll H, Pilet G, Luneau D. *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**,**130**(37):12445-12455
- [31] Sheldrick G M. *SHELXS-97, Program for the Solution of Crystal Structures*, University of Göttingen, Germany, **1997**.
- [32] 王瑾玲, 章丽娟, 缪方明. 天津师范大学学报, **1992**(2):36-42
WANG J L, ZHANG L J, MIAO F M. *Journal of Tianjin Normal University*, **1992**(2):36-42
- [33] 刘小兰, 章丽娟, 周全法, 缪方明, 王如骥, 王宏根, 姚心侃. 结构化学, **1995**,**14**(3):219-223
LIU X L, ZHANG L J, ZHOU Q F, MIAO F M, WANG R J, WANG H G, YAO X K. *Chin. J. Struct. Chem.*, **1995**,**14**(3):219-223
- [34] Alvarez S, Alemany P, Casanova D, Cirera J, Llunell M, Avnir D. *Coord. Chem. Rev.*, **2005**,**249**(17/18):1693-1708