

三种铀酰-Salophen 配合物分子结构与振动光谱的理论研究

肖云霞, 聂长明*, 李小龙, 罗娟, 张方帅

南华大学 化学化工学院, 湖南 衡阳 421001

摘要:采用密度泛函理论(DFT)中的B3LYP方法,在6-31G、6-31G^{**}、6-311G^{**}三种基组水平上,对三种铀酰-Salophen配合物的分子结构进行优化,计算了它们的振动频率和化学位移,并对得到的几何构型、电子结构、红外光谱、热力学性质和化学位移进行了讨论分析。

关键词:密度泛函理论;铀酰-Salophen配合物;分子结构;红外光谱;热力学性质;化学位移

中图分类号:O561.1;O641.121 **文献标志码:**A **文章编号:**0253-9950(2014)02-0097-07

doi:10.7538/hhx.2014.36.02.0097

Theoretical Study on Molecular Structure and Vibrational Spectra of Three Uranyl-Salophen Complexes

XIAO Yun-xia, NIE Chang-ming*, LI Xiao-long, LUO Juan, ZHANG Fang-shuai

College of Chemistry and Chemical Engineering, University of South China, Hengyang 421001, China

Abstract: In this paper, the molecular structures of three uranyl-Salophen complexes were optimized, and the vibrational frequencies and chemical shifts were also calculated using density functional theory (DFT) methods at B3LYP/6-31G, 6-31G^{**}, 6-311G^{**} levels. The geometries, electronic structure, IR spectrum, thermodynamic properties and chemical shifts were discussed and analyzed.

Key words: density functional theory; uranyl-Salophen complex; molecular structure; IR spectrum; thermodynamic properties; chemical shifts

铀及其化合物有着一些与其他元素及化合物不同的特殊分子识别与催化性能,利用铀化合物作催化剂已成为近年的研究热点^[1-4]。如 Castelli等^[5-6]研究了3种铀酰-Salophen配合物催化苯硫酚与环烯酮共轭加成的反应动力学,结果表明,在

氯仿溶液中,三乙胺辅助下,三种铀化合物催化剂对苯硫酚与环烯酮共轭加成反应有很好的对映选择性。这是不对称合成领域的又一拓展,然而迄今为止,关于它们的结构和性质及不对称手性催化理论研究尚未见报道。本工作拟采用密度泛函

收稿日期:2013-10-14;修订日期:2014-01-29

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11275090);湖南省自然科学基金资助项目(12JJ9006);湖南省工业支撑计划项目(2012GK3131);湖南省教育厅重点资助项目(12A9116)

作者简介:肖云霞(1989—),女,湖南怀化人,硕士研究生,应用化学专业

*通信联系人:聂长明(1961—),男,湖南衡阳人,教授,从事分子结构性能研究,E-mail: niecm196123@163.com

理论(DFT)对三种铀酰-Salophen 配合物进行量子化学计算和研究,并对计算结果进行分析讨论。

1 计算方法

本文运用 Gaussian 09 量子化学计算软件,采用密度泛函理论(DFT)中的 B3LYP 方法,结合 6-31G、6-31G^{**}、6-311G^{**}(U 原子采用准相对论赝势(RECP)基组)三种基组,对三种配合物(分子结构如图 1 所示)的几何构型进行了全优化和振动频率计算,频率校正因子分别为 0.961 3^[7]、0.967 0^[8]、0.967 9^[9]。比较结果发现,计算得到的三种配合物几何构型几乎完全相同,其结构均具有 C₁ 对称性。

2 结果与讨论

2.1 分子几何构型

图 2 给出了 6-311G^{**} 基组水平上优化后的三种化合物的能量最低几何构型。表 1 列出 6-31G、6-31G^{**}、6-311G^{**} 三种基组水平上三种配合物的部分几何构型参数:键长(R)、键角(A)和二面角(D),原子编号见图 1(下同)。从表 1 可以

看出,配体 Salophen 中提供的两个 N 原子和两个 O 原子与 U 原子几乎处于同一平面参与配位,而 UO_2^{2+} 与此平面垂直,形成了四角双锥的构型。U—N、U—O 和 U=O 的键长与文献[10-11]值相符合,U—N 比 U—O 键长略长,故前者配位作用略弱一些。三种配合物上苯环中的 C—C 键长为 0.137 7~0.143 5 nm,并不是完全的正六边形,而是稍微有些扭曲,可能是减少苯环与相邻基团之间斥力的原因。此外,B3LYP/6-31G、6-31G^{**}、6-311G^{**} 计算得到的三种配合物几何构型几乎完全相同,3 种方法求出的最大偏差键长为 0.002 8 nm,键角则不足 2°,表明以 B3LYP 优化构型时当基组达到较高水平后无需再行扩展。

2.2 电子结构

通过 DFT 方法,在 6-31G、6-31G^{**}、6-311G^{**} 基组水平上对三种铀酰-Salophen 配合物进行振动频率计算(已作校正),计算结果给出的简正振动模式中没有虚频,表明优化得到的三种配合物几何构型处于真正的位能面上极小点。表 2 列出了三种配合物由 Mulliken 集居数分析所得到的部分原子弹电荷(Q),同时列出了它们的总能量E、

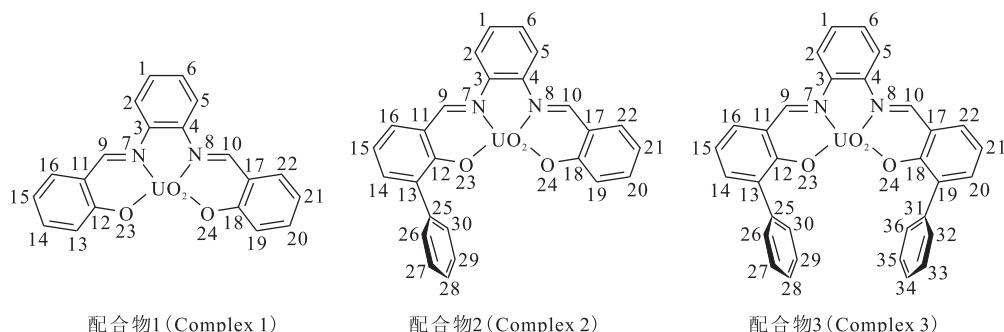


图 1 三种铀酰-Salophen 配合物的分子结构

Fig. 1 Structure of three uranyl-Salophen complexes

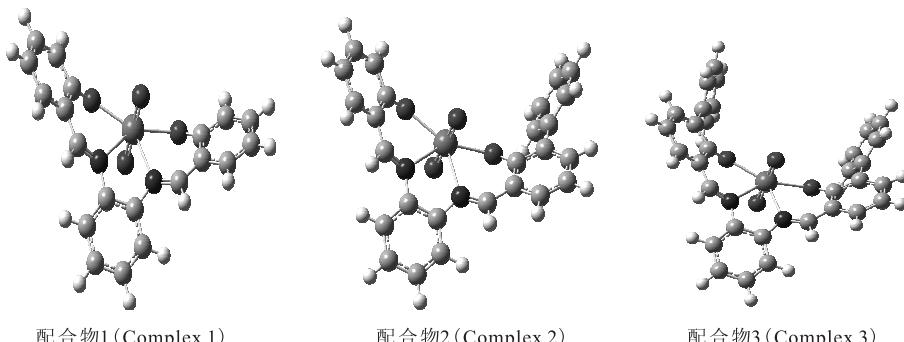


图 2 三种铀酰-Salophen 配合物的几何构型(6-311G^{**})

Fig. 2 Geometry structure of three uranyl-Salophen complexes(6-311G^{**})

表1 三种铀酰-Salophen配合物的部分分子几何构型参数

Table 1 Part of the molecular geometry parameters of three uranyl-Salophen complexes

参数(Parameters)/ 单位(Unit)	配合物1(Complex 1)			配合物2(Complex 2)			配合物3(Complex 3)		
	6-31G	6-31G**	6-311G**	6-31G	6-31G**	6-311G**	6-31G	6-31G**	6-311G**
R(U=O)/nm	0.181 0	0.178 4	0.178 3	0.181 1	0.178 4	0.178 3	0.181 1	0.178 4	0.178 3
R(N ₇ -U)/nm	0.252 4	0.253 3	0.253 7	0.252 1	0.253 2	0.253 6	0.252 2	0.253 1	0.253 6
R(N ₈ -U)/nm	0.252 4	0.253 3	0.253 8	0.252 4	0.253 3	0.253 7	0.252 2	0.253 2	0.253 6
R(O ₂₃ -U)/nm	0.222 4	0.224 6	0.225 0	0.222 1	0.224 4	0.224 9	0.222 2	0.224 4	0.224 9
R(O ₂₄ -U)/nm	0.222 4	0.224 6	0.225 0	0.222 5	0.224 5	0.225 0	0.222 2	0.224 4	0.224 9
R(C=C)/nm	0.138 6~0.143 3	0.138 1~0.143 5	0.137 8~0.143 3	0.138 4~0.143 3	0.138 0~0.143 5	0.137 7~0.143 3	0.138 4~0.143 2	0.138 0~0.143 4	0.137 7~0.143 2
A(O=U=O)/(°)	179.2	179.7	179.9	179.1	179.8	179.9	179.3	179.7	179.9
A(C ₄ -C ₃ -N ₇)/(°)	117.9	117.6	117.8	117.9	117.5	117.7	117.8	117.5	117.7
A(C ₃ -C ₄ -N ₈)/(°)	117.9	117.6	117.8	117.9	117.6	117.7	117.8	117.5	117.7
A(C ₉ -C ₁₁ -C ₁₂)/(°)	123.7	123.6	123.5	123.5	123.4	123.3	123.5	123.3	123.2
A(C ₁₀ -C ₁₇ -C ₁₈)/(°)	123.7	123.6	123.5	123.7	123.6	123.5	123.5	123.3	123.2
A(N ₇ -U-N ₈)/(°)	66.1	65.2	65.2	66.1	65.1	65.2	66.0	65.1	65.0
A(O ₂₃ -U-O ₂₄)/(°)	148.1	149.6	150.0	148.8	150.4	150.8	149.8	151.4	151.8
A(C ₁₂ -C ₁₃ -C ₂₅)/(°)	-	-	121.7	121.3	121.1	121.7	121.4	121.2	121.2
A(C ₁₈ -C ₁₉ -C ₃₁)/(°)	-	-	-	-	-	-	121.7	121.4	121.2
D(N ₇ -O ₂₃ -O ₂₄ -N ₈)/(°)	0.0	-0.0	-0.0	-0.0	-0.1	-0.2	0.0	-0.0	0.0
D(N ₈ -N ₇ -O ₂₃ -O ₂₄)/(°)	-0.0	0.0	0.0	0.3	0.2	0.2	-0.0	0.0	-0.0
D(O ₂₃ -O ₂₄ -N ₈ -U)/(°)	-2.5	-1.8	-2.1	-2.3	-1.7	-2.0	-2.2	-1.5	-1.8
D(O ₂₃ -N ₇ -O ₂₄ -U)/(°)	5.7	4.0	4.7	5.5	3.9	4.7	4.9	3.3	4.0
D(C ₃ -N ₇ -C ₉ -C ₁₁)/(°)	171.1	172.5	172.0	171.2	172.8	172.3	171.5	172.7	172.2
D(C ₄ -N ₈ -C ₁₀ -C ₁₇)/(°)	-171.1	-172.5	-172.0	-171.4	-172.7	-172.3	-171.5	-172.7	-172.2
D(C ₁₂ -N ₁₃ -C ₂₅ -C ₂₆)/(°)	-	-	137.6	135.7	134.2	137.3	136.0	134.9	134.9
D(C ₁₈ -N ₁₉ -C ₃₁ -C ₃₂)/(°)	-	-	-	-	-	-	-	-136.07	-134.9

前线分子轨道的能量 E_{HOMO} 和 E_{LUMO} 、能隙 $\Delta E_{\text{H-L}}$ ($\Delta E_{\text{H-L}}$ 为 E_{HOMO} 与 E_{LUMO} 之差的绝对值)、偶极矩 p 、极化率 α 、硬度 η 、化学势 μ 、电负性 χ 及亲电指数 ω 。其中, E 、 E_{HOMO} 、 E_{LUMO} 、 $\Delta E_{\text{H-L}}$ 、 η 、 μ 、 ω 和 χ 的单位为 eV, p 单位为 C·m, η 、 μ 、 χ 和 ω 通过以下公式^[12]计算得到。

$$I = -E_{\text{HOMO}}; A = -E_{\text{LUMO}} \quad (1)$$

$$\eta \approx \frac{1}{2}(E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}) = \frac{1}{2}(I - A) \quad (2)$$

$$\mu \approx \frac{1}{2}(E_{\text{LUMO}} + E_{\text{HOMO}}) = -\frac{1}{2}(I + A) \quad (3)$$

$$\chi = (I + A)/2 \quad (4)$$

$$\omega = \mu^2/(2\eta) \quad (5)$$

从表 2 可知, 不同基组下, 三种配合物的各原子净电荷(无论正负)差异不是很大, 三种配合物中的 U 原子带正电荷, 而与它配位的 O、N 原子均具负电荷, U 处于 O、N 原子形成的负电荷空穴的中心。且配合物中 U 的净电荷不是原来的 +6, 说明 N、O 提供的孤对电子与 U 配位, 使 U 的正电荷部分离域到配位原子上, 因而 U 原子的空轨道与 O、N 原子孤对电子的轨道相互作用, 形成了配位键。根据其净电荷可以预见, 配合物中的 U 仍具有成键能力^[5-6], 如具有接受 O: 的孤对电子的能力, 因而可以削弱 O=C 键, 起到活化烯酮类分子的作用, 有关理论研究另文报道。同时, 比较三种配合物不同基组下的总能量可知: 6-311G** 基组水平上计算得到的总能量是最低的, 即得到了最稳定的构象。

HOMO 能级的负值反映第一电离能(I), E_{HOMO} 越高, 越容易失去电子; LUMO 能级的负值近似等于物质的电子亲和能(A), E_{LUMO} 越低, 越容易得到电子^[12]。表 2 中, 不同基组水平上的 E_{HOMO} 和 E_{LUMO} 相差不大, $\Delta E_{\text{H-L}}$ 、 η 、 μ 、 χ 及 ω 相近, 最大偏差能隙、硬度、化学势、电负性和亲电指数分别为 0.073 4、0.036 7、0.181 0、0.181 0、0.611 2 eV。三种配合物在同一基组下的 $\Delta E_{\text{H-L}}$ 和 η 的高低顺序为: 配合物 1>配合物 2>配合物 3; $|\mu|$ 、 χ 和 ω 的高低顺序为: 配合物 3>配合物 1>配合物 2。此外, 同一基组下, 随着侧基上苯环数量的增加, 三种配合物的偶极矩变小, 即极性减小。

2.3 红外光谱

红外光谱是物质定性的重要方法, B3LYP/

6-311G** 水平上计算得到的三种配合物的红外光谱图示于图 3, 同时, 表 3 给出了配体及配合物的主要红外光谱数据。从表 3 可知, 各相应的特征振动与配体相比, 配合物中的 C=N 伸缩振动频率分别移动了 52、52、60 cm⁻¹, 说明三种配体中 C=N 上的 N 原子均与 U 发生了配位作用, 形成了 U—N 键。C—O 伸缩振动频率分别移动了 -21、-3、24 cm⁻¹, 这说明配体中 C—O 上的 O 原子参加了配位, 图 3 中 452、476、492 cm⁻¹ 处出现吸收峰, 证实形成了 U—O 键^[13]。这些变化是由于配位原子参与配位而影响了配体中相关基团的键力常数, 导致振动频率发生了变化。同时, 配合物 1、2、3 分别在 940 cm⁻¹ 出现强吸收峰, 可认为这是铀酰基团 UO₂²⁺ 的不对称伸缩振动。此外, 在 1 564、1 572、1 572 cm⁻¹ 处的强吸收峰为三种配合物苯环骨架 C=C 键的伸缩振动吸收峰, 表 3 中配体及配合物分别在 1 696、1 644、1 636 cm⁻¹ 处的吸收峰, 归属于 C=N 的振动吸收峰, 该吸收峰为席夫碱配合物的特征峰。

2.4 热力学性质

表 4 列出了 B3LYP/6-311G** 方法计算的三种配合物在 298.15 K、 1.013×10^5 Pa 下的热力学性质。从表 4 可知: 随着取代苯环数目的增加, 分子恒压热容、恒容热容和熵增加, 而焓却减小。

2.5 化学位移

本文在 B3LYP/6-311G** 水平上用规范无关原子轨道(gauge-independent atomic orbital, GIAO)方法计算了三种配体、三种配合物和四甲基硅烷(TMS)的核磁共振氢谱和碳谱。其中, TMS 中 H 的屏蔽值为 31.995 5, C 的屏蔽值为 184.372 1, 铼酰-Salophen 配体与配合物的¹H NMR 及¹³C NMR 化学位移(TMS 的屏蔽值减去化合物的计算屏蔽值)列于表 5, 原子编号见图 1。由表 5 可知, 在三种配体的¹H NMR 谱中, 分别在 4.04、5.50、4.10、5.56 ppm 处出现酚 O—H 的质子信号, 而在配合物中该信号消失, 证实了配体中 O—H 上的 O 原子均与 U 发生配位作用, 形成 U—O 键。在¹³C NMR 谱中, 配合物中的 $\delta(\text{C}=\text{N})$ 比相应的配体向低场分别移动了 9.31、9.40、9.37、9.53 ppm, 而 $\delta(\text{Ar}-\text{C})$ 没有发生明显变化, 由此可以推测配体中 C=N 上的 N 原子与 U 配位成键。配合物中的 $\delta(\text{C}-\text{O})$ 与相应的配体相比明显移向低场, 也证实了 U—O 键的形成。

表2 三种铀酰-Salophen配合物的电子结构
Table 2 Electronic structure of three uranyl-Salophen complexes

参数(Parameters)/ 单位(Unit)	配合物1(Complex 1)			配合物2(Complex 2)			配合物3(Complex 3)		
	6-31G	6-31G**	6-311G**	6-31G	6-31G**	6-311G**	6-31G	6-31G**	6-311G**
Q(U)	1.3111	1.6016	1.6137	1.3247	1.6110	1.6308	1.3395	1.6218	1.6510
Q(N ₇)	-0.6367	-0.5367	-0.5802	-0.6358	-0.5344	-0.5783	-0.6355	-0.5339	-0.5783
Q(N ₈)	-0.6367	-0.5367	-0.5801	-0.6369	-0.5362	-0.5798	-0.6355	-0.5339	-0.5783
Q(C ₉)	0.0616	0.0821	0.2047	0.0574	0.0787	0.2054	0.0572	0.0781	0.2047
Q(C ₁₀)	0.0617	0.0821	0.2047	0.0614	0.0818	0.2042	0.0572	0.0781	0.2048
Q(O ₂₃)	-0.6689	-0.6201	-0.5727	-0.6745	-0.6250	-0.5855	-0.6745	-0.6257	-0.5869
Q(O ₂₄)	-0.6689	-0.6201	-0.5728	-0.6691	-0.6207	-0.5732	-0.6745	-0.6257	-0.5868
$10^{-4}E/\text{eV}$	-4.510	-4.511	-4.512	-5.139	-5.140	-5.141	-5.768	-5.769	-5.770
$E_{\text{HOMO}}/\text{eV}$	-5.8069	-5.7198	-5.9239	-5.6845	-5.6164	-5.8396	-5.6763	-5.6083	-5.8287
$E_{\text{LUMO}}/\text{eV}$	-2.6069	-2.5688	-2.7973	-2.6014	-2.5660	-2.8001	-2.5960	-2.5688	-2.8055
$\Delta E_{\text{H1}}/\text{eV}$	3.2000	3.1510	3.1266	3.0831	3.0504	3.0395	3.0803	3.0395	3.0232
$10^{29}\rho/(C \cdot m)$	1.742	1.481	1.400	1.696	1.457	1.398	1.646	1.420	1.380
α	322.6147	325.986	337.5933	390.4507	395.121	409.5243	454.603	461.168	478.7237
η/eV	1.6000	1.5755	1.5633	1.5415	1.5252	1.5200	1.5402	1.5200	1.5116
μ/eV	-4.2069	-4.1443	-4.3606	-4.1429	-4.0912	-4.3198	-4.1361	-4.0885	-4.3171
χ/eV	4.2069	4.1443	4.3606	4.1429	4.0912	4.3198	4.1361	4.0885	4.3171
ω/eV	5.5305	5.4507	6.0816	5.5672	5.4871	6.1384	5.5536	5.4986	6.1648

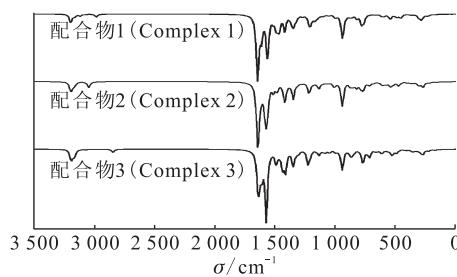


图3 三种铀酰-Salophen配合物的红外光谱

Fig. 3 IR spectra of three uranyl-Salophen complexes

3 结 论

本文对三种铀酰-Salophen配合物在B3LYP/6-31G、6-31G^{**}、6-311G^{**}(U原子采用准相对论赝势(RECP)基组)基组水平上进行了

量子化学计算,分别从分子几何构型、电子结构、红外光谱、热力学性质及化学位移方面进行了讨论。得到如下结论:

(1) B3LYP/6-31G、6-31G^{**}、6-311G^{**}计算得到的三种配合物几何构型几乎完全相同,其结构均具有C₁对称性;

(2) 三种配合物中的U仍具有成键能力,如具有接受O:的孤对电子的能力,因而可以削弱O=C键,起到活化烯酮类分子的作用;

(3) 通过分析计算得到的红外光谱和核磁共振数据,证实了三种配合物中U—N及U—O键的形成。

此研究初步从理论上阐明了这三种配合物的结构,同时为实验研究提供了参考依据,为深入研究铀酰-Salophen配合物结构与性能关系打下了基础。

表3 配体及配合物的主要红外光谱数据

Table 3 Major IR data of ligands and complexes

 cm^{-1}

配体及配合物(Ligands and complexes)	$\nu(\text{C}=\text{N})$	$\nu(\text{C}=\text{C})$	$\nu(\text{C}-\text{O})$	$\nu(\text{U}-\text{O})$	$\nu(\text{U}=\text{O})$
配体1(Ligand 1)	1 696	1 615	1 327	-	-
配合物1(Complex 1)	1 644	1 564	1 348	452	940
配体2(Ligand 2)	1 696	1 615	1 345	-	-
配合物2(Complex 2)	1 644	1 572	1 348	476	940
配体3(Ligand 3)	1 696	1 633	1 372	-	-
配合物3(Complex 3)	1 636	1 572	1 348	492	940

表4 三种铀酰-Salophen配合物的热力学性质

Fig. 4 Thermal properties of three uranyl-Salophen complexes

配合物(Complexes)	$c_p^\ominus / (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$c_v^\ominus / (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$S^\ominus / (\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	$10^{-4} H^\ominus / \text{eV}$
1	384.528	376.213	664.612	-4.512
2	468.572	460.257	775.417	-5.141
3	550.256	541.941	870.285	-5.770

注(Note): $T=298.15 \text{ K}$, $p=1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$

表5 配体及配合物的¹H NMR及¹³C NMR化学位移Table 5 ¹H NMR and ¹³C NMR chemical shift of ligands and complexes

ppm

配体及配合物 (Ligands and complexes)	¹ H NMR				
	$\delta(\text{Ar}-\text{H})$	$\delta(\text{C}_9-\text{H})$	$\delta(\text{C}_{10}-\text{H})$	$\delta(\text{O}_{23}-\text{H})$	$\delta(\text{O}_{24}-\text{H})$
配体1(Ligand 1)	6.50~7.59	8.40	8.40	4.04	4.04
配合物1(Complex 1)	6.92~7.71	8.75	8.75	-	-
配体2(Ligand 2)	6.55~7.69	8.49	8.41	5.50	4.10
配合物2(Complex 2)	6.89~8.71	8.86	8.73	-	-
配体3(Ligand 3)	6.69~7.71	8.50	8.50	5.56	5.56
配合物3(Complex 3)	7.01~8.67	8.85	8.85	-	-

续表5

配体及配合物 (Ligands and complexes)	¹³ C NMR				
	$\delta(\text{Ar}-\text{C})$	$\delta(\text{C}_{12}-\text{O})$	$\delta(\text{C}_{18}-\text{O})$	$\delta(\text{C}_9=\text{N})$	$\delta(\text{C}_{10}=\text{N})$
配体 1(Ligand 1)	119.22~157.16	164.80	164.80	160.78	160.78
配合物 1(Complex 1)	122.40~154.93	181.20	181.20	170.09	170.09
配体 2(Ligand 2)	119.20~157.52	161.53	164.83	161.12	160.82
配合物 2(Complex 2)	122.39~155.02	178.24	178.25	170.52	170.19
配体 3(Ligand 3)	121.42~157.32	161.56	161.56	161.03	161.03
配合物 3(Complex 3)	122.83~155.04	178.23	178.24	170.56	170.56

参考文献:

- [1] Fox A R, Bart S C, Meyer K, et al. Towards uranium catalysts[J]. Nature, 2008, 455(7211): 341-349.
- [2] Andrea T, Eisen M S. Recent advances in organothorium and organouranium catalysis[J]. Chem Soc Rev, 2008, 37: 550-567.
- [3] Enthaler S. Straightforward uranium-catalyzed dehydration of primary amides to nitriles[J]. Chem Eur J, 2011, 17(34): 9316-9319.
- [4] Hayes C E, Leznoff D B. Diamido-ether uranium(IV) alkyl complexes as single-component ethylene polymerization catalysts[J]. Organometallics, 2010, 29 (4): 767-774.
- [5] Castelli V V A, Cort A D, Mandolini L, et al. A kinetic study of the conjugate addition of benzenethiol to cyclic enones catalyzed by a nonsymmetrical uranyl-salophen complex[J]. J Org Chem, 2007, 72: 5383-5386.
- [6] Cort A D, Mandolini L, Schiaffino L. The role of attractive van der waals forces in the catalysis of Michael addition by a phenyldecorated uranyl-salophen complex[J]. J Org Chem, 2008, 73: 9439-9442.
- [7] Ramos J M, Versiane O, Felcman J, et al. FT-IR vibrational spectrum and DFT: B3LYP/6-31G
- structure and vibrational analysis of guanidinoacetic-serinenickel(II) complex: [Ni(GAA)(Ser)][J]. Spectrochim Acta, Part A, 2007, 67: 1037-1045.
- [8] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian03, Revision C. 02 [M]. Wallingford: Gaussian, 2004.
- [9] Andersson M P, Uvdal P. New scale factors for harmonic vibrational frequencies using the B3LYP density functional method with the triple- ζ basis set 6-311+G(d,p)[J]. J Phys Chem A, 2005, 109: 2937-2941.
- [10] Enriquez A E, Scott B L, Neu M P. Base-driven assembly of large uranium oxo/hydroxo clusters[J]. Inorg Chem, 2005, 44: 7403-7413.
- [11] Stemmler A J, Kampf J W, Pecoraro V L. A planar 15-metallakrone-5 that selectively binds the uranyl cation[J]. Angew Chem Int Ed Engl, 1996, 35(23-24): 2841-2843.
- [12] Liu Y, Ke Z F, Cui J F, et al. Synthesis, inhibitory activities, and QSAR study of xanthone derivatives as α -glucosidase inhibitors[J]. Bioorg Med Chem, 2008, 16: 7185-7192.
- [13] Agarwal R K, Arora K, Dutt P. Studies on thorium(IV) and dicbouranium(VI) complexes of schiff bases derived from 4-aminoantipyrine[J]. Synth React Inorg Met-Org Chem, 1994, 24(2): 301.