

电负性拓扑指数 ${}^m F$ 及其对无机理化性质的预测

徐士友*, 汤家华

(巢湖学院化学系, 巢湖 238000)

摘要: 受 Randic 分子连接性拓扑指数 ${}^m X$ 的启发, 构建了电负性拓扑指数 ${}^m F$. 用 ${}^m F$ 的 0、1 阶指数分别与 20 种碱金属卤化物的晶格能 U 、生成焓 $\Delta_f H_m$ 、离子水化能 $\Delta_f G_m^\ominus$ 、51 种金属离子水合热 $\Delta_f H_h^\ominus$ 和 80 种离子标准生成热 $\Delta_f H_m^\ominus$ 进行关联, 拟合的回归方程的相关系数(指数)分别为 0.9954(0.9954)、0.9835(0.9840)、0.9794(0.9795)、0.9948 和 0.9865, 满足优级或良级标准. 结构选择性达到唯一性表征. 预测取得满意的结果.

关键词: 电负性; 拓扑指数; 相关性; 晶格能; 生成焓; 离子水化能; 离子水合热; 离子标准生成热

中图分类号: O6-051

文献标识码: A

The Topological Index ${}^m F$ of Electronegativity and Its Calculation of Physical and Chemical Properties of Inorganic Compounds

Xu Shiyou*, Tang Jiahua

(Department of Chemistry, Chaohu College, Chaohu 238000)

Abstract Enlightened by the topological index ${}^m X$ of the Randic molecular connection, the author formed the topological index ${}^m F$ of electronegativity. Utilizing the zero and first order indexes of ${}^m F$ related with 20 kinds of alkali halide consisting of lattice energy, enthalpy of formation and hydrated energy, 51 kinds of ion hydrated heat and 80 kinds of ion standard heat of formation, the several regression equations were suggested. Their related coefficients (indexes) are 0.9954 (0.9954), 0.9835 (0.9840), 0.9794 (0.9795), 0.9948 and 0.9865, which meet the good or excellent standards. The structure selectivity achieves its only expression. Hence the calculation gains satisfactory results.

Key word Electronegativity, Topological index, Correlativity, Lattice energy, Enthalpy of formation, Ion hydrated energy, Hydrated heat, Ion standard heat of formation

1 引言

分子和原子的拓扑性质是分子和原子固有的几何性质, 它可以反映分子和原子结构的重要信息. 近年来, 化学工作者越来越重视用拓扑指数进行定量结构与性质相关性(QSPR)的研究. 自 1947 年 Wiener 提出第一个拓扑指数^[1]以来, 化学界已相继提出约 200 种不同类型的拓扑指数, 多数用于有机理化性质的预测. 拓扑指数在化学中的应用已成为当前信息化学内容之一.

1975 年, Randic 提出了著名的分子连接性拓扑指数 ${}^1 X$, 定义了分子的支化度 p_i ^[2], 后来由 Kier 和 Hall 等人加以发展, 形成了完整的分子连接性拓扑指数 ${}^m X$, 用点价 δ_i 代替 p_i ^[3]. ${}^m X$ 为化合物中若干个相邻原子的 δ_i 乘积的平方根倒数之和

$${}^m X = \sum (\delta_i \delta_j \delta_k \dots)^{-0.5} \quad (1)$$

该拓扑指数可以组成一个系列. 其 0 阶(${}^0 X$)、1 阶(${}^1 X$)指数分别为:

$${}^0 X = \sum (\delta_i)^{-0.5} \quad (2)$$

$${}^1X = \sum (\delta_i \delta_j)^{-0.5} \quad (3)$$

Randic 拓扑指数原来只应用于烷烃. 后来, 有些学者对其核心概念点价 δ_i 进行适当的修改, 得出一些形式各异, 用途不同的新的拓扑指数. 其中有一些可用于无机物理化性质的预测^[4-12].

2 电负性拓扑指数 mF 的构建

本工作认为, 无机物的理化性质与组成无机物的 i 元素的 Pauling 电负性 x_{pi} ^[13]、元素的氧化数 Z_i (对简单离子, 即为离子的电荷数) 以及元素原子的最外价电子层数 n_i 密切相关. 为了预测一些无机物的理化性质, 本工作对 Randic 拓扑指数进行修改, 将其核心概念点价 δ_i 修改为:

$$\delta_i = \sqrt{\frac{n_i^2}{Z_i^4 x_{pi}}} \quad (4)$$

将(4)式值带入(1)式, 就构成了一种新的拓扑指数, 即电负性拓扑指数 mF , 其 0 阶(0F)、1 阶(1F) 指数分别为

$${}^0F = \sum \left(\sqrt{\frac{n_i^2}{Z_i^4 x_{pi}}} \right)^{-0.5} \quad (5)$$

$${}^1F = \sum \left(\sqrt{\frac{n_i^2}{Z_i^4 x_{pi}}} \sqrt{\frac{n_j^2}{Z_j^4 x_{pj}}} \right)^{-0.5} \quad (6)$$

式(5)中的“ \sum ”是对分子中所有原子个数求和; 对简单离子, 即是对离子电荷数求和. 式(6)中的“ \sum ”是对分子中所有边数(化学单键数)求和. 以上表达式中的数据皆取正值.

计算示例, 如 LiCl , $n_{\text{Li}} = 2$, $Z_{\text{Li}^+} = 1$, $x_{\text{Li}} = 0.98$, $n_{\text{Cl}} = 3$, $Z_{\text{Cl}^-} = 1$, $x_{\text{Cl}} = 3.16$, 则

$${}^0F = 1 \times \left(\sqrt{\frac{4}{1 \times 0.98}} \right)^{-0.5} + 1 \times \left(\sqrt{\frac{9}{1 \times 3.16}} \right)^{-0.5} = 1.4733$$

$${}^1F = 1 \times \left(\sqrt{\frac{4}{1 \times 0.98}} \times \sqrt{\frac{9}{1 \times 3.16}} \right)^{-0.5} = 0.5416$$

对简单离子, 如 Mg^{2+} , $n_{\text{Mg}} = 3$, $Z_{\text{Mg}^{2+}} = 2$, $x_{\text{Mg}} = 1.31$, 则

$${}^0F = 2 \times \left(\sqrt{\frac{9}{16 \times 1.31}} \right)^{-0.5} = 2.47$$

由(5)、(6)式可以看出, 0F 、 1F 与元素的氧化数(离子的电荷数) Z_i 、电负性 x_{pi} 正相关, 也与分子

中原子个数或边数(化学单键数)正相关, 而与原子的最外价电子层数 n_i 负相关.

3 mF 对一些无机物理化性质的预测

3.1 mF 对碱金属卤化物晶格能 U 的预测

晶格能 U 是指 1 mol 离子化合物中的气态正负离子由相互远离的状态互相接近结合成离子晶体时所释放的能量, 通常取正值. 计算晶格能有理论公式和不少经验公式^[14], 但多数公式都比较复杂, 计算结果也不甚精确. 本工作将文献[15]中的 20 种碱金属卤化物(MX)的晶格能 U (kJ/mol) 与拓扑指数 0F 、 1F 关联, 用最小二乘法处理, 拟合的线性回归方程为

$$U = 403.93 + 899.32 {}^1F \quad (7)$$

$$r = 0.9954 (0.9801^{[10]}, 0.9841^{[11]}),$$

$$N = 20, F = 1943, S = 10.6$$

$$U = 400.16 + 5.72 {}^0F + 890.33 {}^1F \quad (8)$$

$$R = 0.9954 (0.9818^{[10]}, 0.9906^{[11]}),$$

$$N = 20, F = 918, S = 10.6$$

式中, N 为回归样品数; r 为相关系数; R 为相关指数; F 为 Fischer 检验值; S 为估计标准误差(下同); 括号内的数值分别是文献[10]、[11]给出的相关系数和相关指数. 由此可知, 本工作计算的结果远优于文献[10]和[11]. 根据(7)式和(8)式计算的结果列于表 1 中.

3.2 mF 对碱金属卤化物生成焓 $\Delta_r H_m$ 的预测

这里的碱金属卤化物生成焓 $\Delta_r H_m$ 是指 1 mol 气态碱金属卤化物离解为互相远离的气态碱金属离子和气态卤素离子所需要的能量(不同于离子键的键能).

将文献[16]中所给出的碱金属卤化物的生成焓 $\Delta_r H_m$ 值与 0F 、 1F 关联, 拟合的回归方程为

$$\Delta_r H_m = 250.57 + 703.87 {}^1F \quad (9)$$

$$N = 20, r = 0.9835, F = 532, S = 16.0$$

$$\Delta_r H_m = 287.71 - 57.30 {}^0F + 795.46 {}^1F \quad (10)$$

$$N = 20, R = 0.9840, F = 259, S = 15.7$$

根据(9)、(10)式计算的结果一并列于表 1 中.

3.3 mF 对碱金属卤化物离子水化能 $\Delta_r G_m^\theta$ 的预测

碱金属卤化物的离子水化能是指碱金属气态离子和卤素气态离子各 1 mol 溶于足够大量水中所产生的自由能变化.

表 1 碱金属卤化物(MX)的晶格能(U)、生成焓(Δ_rH_m^θ)和离子水化能 Δ_rG_m^θ 和与 ⁰F、¹F 的相关性

Table 1 Correlativity between the lattice (U), enthalpy of formation (Δ_rH_m^θ), ion hydrated energy (Δ_rG_m^θ) of alkali halides and ⁰F, ¹F

MX			U/(kJ/mol)			Δ _r H _m ^θ /(kJ/mol)			- Δ _r G _m ^θ /(kJ/mol)		
	⁰ F	¹ F	Exp. [15]	Cal.(7)	Cal.(8)	Exp. [16]	Cal.(9)	cal.(10)	Exp. [17]	Cal.(11)	Cal.(12)
				equation	equation		equation	equation		equation	equation
LiF	1.7023	0.7027	1049.0	1035.9	1035.5	755	745	749	942.3	939.0	941.4
NaF	1.5657	0.5662	927.7	913.1	913.2	632	649	648	837.5	844.6	844.2
KF	1.4746	0.4752	825.9	831.3	831.7	569	585	581	765.9	775.2	772.5
RbF	1.4243	0.4250	788.9	786.1	786.7	548	550	544	742.6	734.0	729.9
CsF	1.3836	0.3844	758.9	749.6	750.3	536	521	514	719.4	698.9	693.4
LiCl	1.4733	0.5416	862.0	891.0	890.8	628	632	634	820.1	826.4	828.5
NaCl	1.3367	0.4364	786.0	796.4	796.3	544	558	558	715.3	743.6	744.4
KCl	1.2456	0.3662	716.8	733.3	733.3	481	508	508	643.7	682.5	682.2
RbCl	1.1953	0.3276	687.9	698.5	698.7	460	481	480	620.5	646.5	645.4
CsCl	1.1546	0.2963	668.2	670.4	670.6	460	459	457	597.2	615.6	613.8
LiBr	1.3594	0.4614	818.6	818.9	818.7	603	575	577	791.4	764.1	765.7
NaBr	1.2228	0.3718	751.8	738.3	738.2	519	512	513	680.6	687.6	688.9
KBr	1.1316	0.3120	688.6	684.5	684.4	460	470	471	615.7	631.3	632.0
RbBr	1.0814	0.2791	661.0	654.9	654.8	441	447	448	591.5	598.0	598.3
CsBr	1.0407	0.2524	635.0	630.9	630.8	444	428	429	568.2	569.5	569.4
LiI	1.2747	0.4018	762.7	765.3	765.2	565	533	534	769.5	714.1	715.3
NaI	1.1381	0.3238	703.0	695.1	695.0	492	478	480	664.7	642.8	644.3
KI	1.0469	0.2717	646.9	648.3	648.0	435	442	444	593.1	590.2	591.7
RbI	0.9967	0.2430	625	622.5	622.2	416	422	424	569.8	559.1	560.5
CsI	0.9560	0.2198	602	601.6	601.3	414	405	408	546.6	532.5	533.8

$x_{pi}^{[14]}$: Li=0.98, Na=0.93, K=0.82, Rb=0.82, Cs=0.79, F=3.98, Cl=3.16, Br=2.96, I=2.66.

将文献[17]中所给出的碱金属卤化物的离子水化能 Δ_rG_m^θ 与 ⁰F、¹F 关联,用最小二乘法处理的回归方程为:

$$- \Delta_r G_m^\theta = 16.72 + 1100.25 {}^1F^{0.5} \quad (11)$$

$$N = 20, r = 0.9794,$$

$$F = 423, S = 21.8$$

$$- \Delta_r G_m^\theta = 78.32 - 109.81 {}^0F^{0.5} + 1200.47 {}^1F^{0.5} \quad (12)$$

$$N = 20, R = 0.9795, F = 201, S = 21.5$$

根据(11)式和(12)式计算的结果也列于表 1 中.

3.4 ^mF 对离子水合热 Δ_rH_h^θ 的预测

离子水合热是 1 mol 气态离子溶于大量水中成为无限稀释溶液时所释放的热量. 通常文献中列出的是 298 K 和 101 kPa 下的数值,以 Δ_rH_h^θ 表示. 离子水合热可用下述理论公式^[18]进行计算

$$\Delta_r H_h^\theta = - \frac{N_A Z_i^2 \varepsilon^2}{2r_i} \left[1 - \frac{1}{D} - \frac{T}{D^2} \left(\frac{\partial D}{\partial T} \right)_p \right] \quad (13)$$

式中, N_A 为 Avogadro 常数; Z_i 为离子的电荷数; ε 为电子的电量; r_i 为离子晶体半径; T 为绝对温标; D 为溶剂的宏观介电常数. 用(13)式计算 Δ_rH_h^θ 有两个缺点: 一是公式复杂, 计算比较麻烦; 二是计算偏差较大. 该式在理论上具有重要意义, 但实际应用甚感不便. 因此, 有些学者寻找计算 Δ_rH_h^θ 的半定量经验公式^[19], 虽然计算比较准确, 但所用参数过多.

本工作经分析得知, - Δ_rH_h^θ 与电负性拓扑指数 ⁰F、¹F 正相关, 因而, 试图用^mF 来预测离子水合热 Δ_rH_h^θ 将文献[19]中的 51 种金属离子水合热与 ⁰F 关联, 用最小二乘法进行回归分析, 得出的方程为:

$$- \Delta_r H_h^\theta = - 77.07 + 927.15 {}^0F \quad (14)$$

表 2 离子水合热 $\Delta_r H_h^0$ 、离子标准生成热 $\Delta_f H_m^0$ 和 0F 的相关性
 Table 2 Correlativity between the ion hydrated heat, ion standard heat of formation and 0F

No	M ⁿ⁺	x_{pi}	0F	$-\Delta_r H_h^0$ /(kJ/mol)	$\Delta_f H_m^0$ /(kJ/mol)	No	M ⁿ⁺	x_{pi}	0F	$-\Delta_r H_h^0$ /(kJ/mol)	$\Delta_f H_m^0$ /(kJ/mol)
1	Li ⁺	0.98	0.70	523	681.6	39	Sc ²⁺	1.36	2.16		2245
2	Na ⁺	0.93	0.57	418	603.8	40	Sc ³⁺	1.36	4.86		4633
3	K ⁺	0.82	0.48	335	508.4	41	Ti ²⁺	1.54	2.23	1866	2437
4	Rb ⁺	0.82	0.42	305	484.9	42	Ti ³⁺	1.54	5.01	4297	5089
5	Cs ⁺	0.79	0.38	280	454.0	43	Ti ⁴⁺	1.54	8.91		9260
6	Fr ⁺	0.7	0.34		452	44	V ²⁺	1.63	2.26	1895	2578
7	Be ²⁺	1.57	3.17		2980	45	V ³⁺	1.63	5.08	4406	5046
8	Mg ²⁺	1.31	2.47	1966	2334	46	V ⁵⁺	1.63	14.12		16309
9	Ca ²⁺	1.00	2.00	1548	1913	47	Cr ²⁺	1.66	2.27	1925	2641
10	Sr ²⁺	0.95	1.77	1427	1777	48	Cr ³⁺	1.66	5.11	4623	5628
11	Ba ²⁺	0.89	1.59	1334	1645	49	Mn ²⁺	1.55	2.23	1862	2509
12	B ³⁺	2.04	7.60		7456	50	Mn ³⁺	1.55	5.02	5012	
13	Al ³⁺	1.61	5.85		5467	51	Mn ⁴⁺	1.55	8.93		10777
14	Ga ³⁺	1.81	5.22	4703	5799	52	Mn ⁷⁺	1.55	27.34		38815
15	In ⁺	1.78	0.52		800.8	53	Fe ²⁺	1.83	2.33	1958	2736
16	In ³⁺	1.78	4.65	4163	5325	54	Fe ³⁺	1.83	5.23	4485	5692
17	Tl ⁺	2.04	0.49	335	771.5	55	Co ²⁺	1.88	2.34	2079	2832
18	Tl ³⁺	2.04	4.39	4117	5617	56	Co ³⁺	1.88	5.27	4711	6064
19	C ²⁺	2.55	3.57		4155	57	Ni ²⁺	1.91	2.35	2121	2951
20	C ⁴⁺	2.55	14.30		14560	58	Ni ³⁺	1.91	5.29		6344
21	Si ²⁺	1.90	2.71		2818	59	Y ³⁺	1.22	4.23		4323
22	Si ⁴⁺	1.90	10.84		10408	60	Zr ⁴⁺	1.33	7.68		8065
23	Ge ²⁺	2.01	2.38		2672	61	Nb ⁵⁺	1.6	12.57		13702
24	Ge ⁴⁺	2.01	9.52		10285	62	Mo ⁶⁺	2.16	19.52		22467
25	Sn ²⁺	1.96	2.12	1565	2422	63	Ru ⁴⁺	2.2	8.71		10259
26	Sn ⁴⁺	1.96	8.47	7644	9292	64	Rh ²⁺	2.28	2.20	2033	
27	Pb ²⁺	2.33	2.02	1502	2360	65	Rh ³⁺	2.28	4.94		6015
28	Pb ⁴⁺	2.33	8.07		9523	66	Pd ²⁺	2.20	2.18	2113	3054
29	N ³⁺	3.04	8.40		9306	67	Hf ⁴⁺	1.3	6.97		8184
30	N ⁵⁺	3.04	23.34		26222	68	Ta ⁵⁺	1.5	11.30		12640
31	P ³⁺	2.19	6.32		6156	69	W ⁶⁺	2.36	18.22		19616
32	P ⁵⁺	2.19	17.56		17382	70	Re ⁴⁺	1.9	7.67		9260
33	As ³⁺	2.18	5.47		5781	71	Os ²⁺	2.2	1.99		3247
34	As ⁵⁺	2.18	15.19		16654	72	Ir ²⁺	2.20	1.99	1996	
35	Sb ³⁺	2.05	4.82		5131	73	Ir ⁴⁺	2.20	7.96		9531
36	Sb ⁵⁺	2.05	13.38		14789	74	Pt ²⁺	2.28	2.01	2188	3236
37	Bi ³⁺	2.02	4.38		4988	75	Cu ⁺	1.90	0.59	582	1083
38	Bi ⁵⁺	2.02	12.17		14762	76	Cu ²⁺	1.90	2.35	2121	3100

续表 2.

No	M ⁿ⁺	x _{pi}	⁰ F	- Δ _r H _h ⁰ (kJ/mol)	Δ _f H _m ⁰ (kJ/mol)	No	M ⁿ⁺	x _{pi}	⁰ F	- Δ _r H _h ⁰ (kJ/mol)	Δ _f H _m ⁰ (kJ/mol)
77	Ag ⁺	1.93	0.53	485	1016	86	Pr ³⁺	1.13	3.79	3452	
78	Au ⁺	2.54	0.52	644	1258	87	Nd ³⁺	1.14	3.80	3469	
79	Au ²⁺	2.54	2.06		3237	88	Gd ³⁺	1.20	3.84	3607	
80	Zn ²⁺	1.65	2.27	2058	2770	89	Dy ³⁺	1.22	3.86	3623	
81	Cd ²⁺	1.69	2.04	1828	2610	90	Ho ³⁺	1.23	3.87	3661	
82	Hg ²⁺	2.00	1.94	1845	2877	91	Er ³⁺	1.24	3.88	3674	
83	La ³⁺	1.10	3.76	3368	3905	92	Tm ³⁺	1.25	3.88	3674	
84	Ce ³⁺	1.12	3.78	3427		93	Lu ³⁺	1.27	3.90	3740	
85	Ce ⁴⁺	1.12	6.72	6452							

$$N = 51, r = 0.9948, F = 4675, S = 167.3$$

将(14)式涉及的有关数据列于表2中。

3.5 ^mF 对离子标准生成热 Δ_fH_m⁰ 的预测

离子标准生成热 Δ_fH_m⁰ 是指稳定的单质,在标态下,形成 1 mol 气态离子所需要的能量。将文献[20]中所列出的 80 种正离子(除 La 以外的镧系元素离子)的标准生成热 Δ_fH_m⁰ 与 ⁰F 关联,拟合的线性回归方程为:

$$\Delta_f H_m^0 = -179.38 + 1164.54 {}^0F \quad (15)$$

$$N = 80, r = 0.9865, F = 2830, S = 1061.1$$

将(15)式涉及的有关数据一并列于表2中。

4 预测结果讨论

4.1 ^mF 是一种选择性和相关性均优的拓扑指数

一个理想的拓扑指数,应该具有良好的结构选择性和相关性。本工作构建的电负性拓扑指数 ⁰F、¹F,其结构选择性基本上达到唯一性表征。拟合的几个回归方程,其相关系数和相关指数均大于 0.95,属于优级($r \geq 0.99$)或良级($0.99 > r \geq 0.95$)标准^[21]。特别是 ⁰F、¹F 与碱金属卤化物晶格能 U 的相关系数和相关指数均高达 0.9954。其估计标准误差仅为 10.6,这是个很小的数值,说明实验值围绕回归直线的离散程度很小,实验值与回归直线关系密切。因此,本工作构建的电负性拓扑指数 ^mF 是一种选择性和相关性均很优良的拓扑指数。

4.2 ^mF 是对 Randic 连接性指数 ^mX 的一种改进

Randic 连接性指数 ^mX 原来仅应用烷烃。烷烃分子的中心原子均为 C 原子。在烷烃分子图中,用邻接矩阵进行计算,只须考察 C 原子的支化度。在无机物中,分子中的中心原子各不相同,计算时若仅

考虑中心原子的支化度往往不能很好地预测无机物的理化性质。因此,对无机物及简单离子,必须绘制原子的隐核图,然后找出能从本质上反映所预测的理化性质的结构特征量。本工作选取的结构特征量为元素的氧化数(或离子的电荷数) Z_i 、元素的电负性 x_{pi} 及原子的最外价电子层数 n_i 。以这 3 种原子结构参数构成的点价值与 Randic 的 ^mX 中的点价值在含义上存在重大差别。故本工作的点价值的构建是对 Randic 拓扑指数的一种改进。

4.3 ^mF 蕴含着丰富的原子和分子结构信息

元素的电负性 x_{pi} 越大,元素的氧化数(或离子电荷数) Z_i 越大,原子的最外价电子层数 n_i 越小,该元素形成分子或水合离子时,吸引力越大,则碱金属卤化物的晶格能 U 、生成焓 $\Delta_r H_m$ 、离子水化能 $\Delta_r G_m^0$ 的绝对值越大,离子水合热 $\Delta_r H_h^0$ 和离子标准生成热 $\Delta_f H_m^0$ 的绝对值亦越大,可用表达式综合表示这些影响:

$$\frac{Z_i^4 x_{pi}}{n_i^2}$$

这个表达式反映了原子结构信息,也成了构建点价值的依据。

⁰F、¹F 中的求和(以“ \sum ”表示)反映了分子的结构信息,⁰F 中的“ \sum ”表征分子中各种原子的个数或简单离子的电荷数对 ⁰F 的贡献,¹F 个中的“ \sum ”表征分子中化学单键数对 ¹F 的贡献,反映了分子中相邻原子之间的作用强度,相邻原子间的作用次数越多,作用强度越大。

由上面的讨论可知,拓扑指数 ^mF 在原子(离

子)和分子各个层次上多方面反映了原子和分子结构信息对无机理化性质的影响. 各种原子(离子)、各种分子的结构都是不同的,这必然使 mF 具有良好的区分度,必然使 mF 与无机物的理化性质存在优良的相关性.

综上所述,本工作构建的电负性拓扑指数 mF 是一种新的拓扑指数,建立的回归模型有效,预测取得了满意的结果.

参 考 文 献

- [1] Wiener H. *J. Am. Chem. Soc.*, 1947, **69** : 17
- [2] Randic M. *J. Am. Chem. Soc.*, 1975, **97** : 6609
- [3] Xin Houwen (辛厚文). *Molecular Topology (分子拓扑学)*, Hefei (合肥): China University of Science and Technology Press (中国科学技术大学出版社), 1992. 43
- [4] Zhang Hongguang (张宏光), Xin Houwen (辛厚文). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 1989, **2** : 413
- [5] Xin Houwen (辛厚文), Zhang Hongguang (张宏光). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 1990, **3** : 331
- [6] Li Linfeng (李林峰), You Xiaozeng (游效曾). *Chin. Sci. Bull.* (科学通报), 1993, **38** : 421
- [7] Yang Feng (杨锋), Yan Xiaoci (颜肖慈), Ouyang Li (欧阳礼), *et al.* *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 1998, **11** : 221
- [8] Yang Feng (杨锋), Luo Mingdao (罗明道), Qu Songsheng (屈松生). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 1999, **12** : 747
- [9] Wu Qixun (吴启勋), Qi Zhengxing (祁正兴), Pan Guoqing (潘国庆), *et al.* *Chin. Chem.* (化学通报), 1998, **4** : 44
- [10] Feng Changjun (冯长君). *Chin. J. Inorg Chem.* (无机化学学报), 1999, **15** : 363
- [11] Feng Changjun (冯长君). *Chin. J. Chem. Phys.* (化学物理学报), 2000, **13** : 66
- [12] Feng Changjun (冯长君). *J. Analy. Science.* (分析科学学报), 2002, **18** : 27
- [13] Beijing Normal University (北京师范大学), *et al.* *Inorganic Chemistry (无机化学)*, 3rd Ed., Beijing (北京): Higher Education Press (高等教育出版社), 1992. 246
- [14] Feng Cizhen (冯慈珍), Chen Jian (陈鉴), Yang Hongxiao (杨宏孝), *et al.* *Textbook of Inorganic Chemistry (2) (无机化学教学参考书 (2))*, Beijing (北京): Higher Education Press (高等教育出版社), 1985. 11
- [15] Zheng Nengwu (郑能武), Liu Qingliang (刘清亮), Liu Shuanghuai (刘双怀). *Inorganic Chemistry Principles (无机化学原理)*, Hefei (合肥): China University of Science and Technology Press (中国科学技术大学出版社), 1968. 369
- [16] Brachett E. *Chem. Rev.*, 1961, **60** : 625
- [17] Johnson D A. *Some Thermodynamic Aspects of Inorganic Chemistry (无机化学中一些热力学问题)*, Shanghai (上海): Shanghai Science and Technology Press (上海科学技术出版社), 1986. 148
- [18] Huang Ziqing (黄子卿). *Introduction to Electrolyte Solution Theory (电解质溶液理论导论)*, Beijing (北京): Science Press (科学出版社), 1964. 32
- [19] Zhou Zihua (周志华). *Chinese Chemistry (化学通报)*, 1978, **5** : 35
- [20] Cai Shouhui (蔡寿辉), Feng Yi (冯义). *Chinese Chemistry (化学通报)*, 1985, **6** : 40
- [21] Liu Yajun (刘亚军), Zheng Shijun (郑世钧). *Chemical Research and Application (化学研究与应用)*, 1999, **11** : 108