

中心质子化对Keggin型 α - $[\text{H}_x\text{W}_{12}\text{O}_{40}]^{(8-x)-}$ ($x=1\sim 4$) 结构性能影响的DFT研究: 笼内约束氢键的电子结构 (I)

王金玉^{①*}, 罗华锋^①, 吴同^①, 王健^①, 王藩侯^①, 胡常伟^②, 熊燕^③

① 四川省高校计算物理重点实验室, 应用化学研究所, 宜宾学院, 宜宾 644007;

② 绿色化学与技术教育部重点实验室, 四川大学化学学院, 成都 610064;

③ 重庆大学化学化工学院, 重庆 400044

Effects of central protonation on relationships of structures and properties of the Keggin-type α - $[\text{H}_x\text{W}_{12}\text{O}_{40}]^{(8-x)-}$ ($x=1-4$): The electronic structures with constraint hydrogen bonds in the cage (I)

WANG JinYue^{1*}, LUO HuaFeng¹, WU Tong¹, WANG Jian¹, WANG FanHou¹, HU ChangWei², XIONG Yan³

1 Key Laboratory of Computational Physics in Universities of Sichuan Province, Institute of Applied Chemistry, Yibin University, Yibin 644007, China;

2 Key Laboratory of Green Chemistry and Technology of Ministry of Education, College of Chemistry, Sichuan University, Chengdu 610064, China;

3 School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China

[摘要](#)[图/表](#)[参考文献\(54\)](#)[相关文章\(15\)](#)[点击分布统计](#)[下载分布统计](#)

版权所有 © 《中国科学》杂志社

地址: 北京市东黄城根北街16号, 《科学通报》编辑部, 100717

电话: 010-64036120 E-mail: csb@scichina.org

网络系统维护电话: 010-64034113 E-mail: sys@scichina.org