

研究论文

钒取代 α -Keggin型杂多阴离子簇合物 $[\text{PVnMo}_{12-n}\text{O}_{40}](3+n)^-$ ($n=1\sim 3$)氧化性能的DFT研究

王金月*, a 王 健^a 胡常伟*, b 肖慎修^b

^a宜宾学院化学与化工系 四川省高校计算物理重点实验室 宜宾 644007;

^b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

收稿日期 2008-9-18 修回日期 2009-1-14 网络版发布日期 2009-6-14 接受日期 2009-2-13

摘要

运用密度泛函理论的离散变分(DFT-DVM)方法, 通过理论计算和模拟, 将不同个数V取代的 α -Keggin型磷钼杂多阴离子簇合物以及它们的各个异构体区分开来, 探讨了V的取代效应对所形成物种 $[\text{PVnMo}_{12-n}\text{O}_{40}](3+n)^-$ ($n=1\sim 3$)的氧化活性的影响. 研究表明, 单钒取代的簇阴离子的氧化活性最高, 其次是二钒取代的物种, 三钒取代的物种活性最低. 将计算得到的结果与实验测得的还原电势进行关联后发现, 这些杂多阴离子簇合物的费米能级(E_f)与其第一还原电势(ERP)之间呈现反比变化, 随着V取代个数n的增加, 簇阴离子所带的负电荷数逐渐增大, E_f 值也随之增大, 而相应物种的ERP却逐渐减小. 进一步对含钨杂多阴离子簇合物 $[\text{XW}_{12}\text{O}_{40}]_n^-$ ($X=\text{CoII}, \text{FeIII}, \text{SiIV}, \text{PV}$)的计算分析证实, 这种关系具有一定的普适性; 在此基础上推测了杂多阴离子新物种 $[\text{SW}_{12}\text{O}_{40}]_2^-$ 的存在, 并预测了其可能具有的氧化活性.

关键词 [杂多阴离子](#) [\$\alpha\$ -Keggin型](#) [钒取代效应](#) [氧化性能](#) [密度泛函理论\(DFT\)](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

王金月 jywang@163.com

作者个人主页:

王金月*; a 王 健^a 胡常伟*; b 肖慎修^b

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (370KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“杂多阴离子”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [王金月, 王健, 胡常伟, 肖慎修](#)