

气相和水溶液中铀酰配合物 $\text{UO}_2\text{L}^{2-n^*a}_n$ ($\text{L}=\text{F}^-$, CO_3^{2-} , NO_3^- ; $n=0-6$, $a=1, 2$)的结构和振动光谱

辜家芳 陆春海 陈文凯 许莹 郑金德

福州大学化学系, 福州 350108; 表面物理与化学国家重点实验室, 四川 绵阳 621907; 中国科学院福建物质结构研究所, 福州 350002

摘要:

通过对铀采用相对赝势基组, 其它原子使用6-31+G(d)基组, 应用密度泛函理论(DFT)以及B3LYP方法对 UO_2+2 离子与 F^- 、 CO_3^{2-} 和 NO_3^- 的各配位结构进行优化和频率计算. 计算考虑了气相和水溶剂化两种状态, 其中溶剂化模型采用连续导体介质理论模型(CPCM). 计算结果显示配体的配位数与 $\text{O}=\text{U}=\text{O}$ 对称伸缩振动频率存在线性关系. 配体在气相和水溶液中存在的关系基本符合通式: $\nu_s=-A_{\text{gas}}n+983$ 和 $\nu_s=-A_{\text{aq}}n+821$ (A_{gas} 和 A_{aq} 为常数, 表示每增加一个配体振动频率的变化值; n 为配体配位数). 其中 F^- 对应 $A_{\text{gas}}=53 \text{ cm}^{-1}$, $A_{\text{aq}}=11 \text{ cm}^{-1}$; CO_3^{2-} 对应 $A_{\text{gas}}=85 \text{ cm}^{-1}$, $A_{\text{aq}}=19 \text{ cm}^{-1}$; NO_3^- 对应 $A_{\text{gas}}=48 \text{ cm}^{-1}$, $A_{\text{aq}}=-10 \text{ cm}^{-1}$. 并且 A_{aq} 值与实验值一致.

关键词: 铀酰离子 密度泛函理论 相对论赝势 溶剂化 振动频率

收稿日期 2008-11-07 修回日期 2008-12-19 网络版发布日期 2009-02-23

通讯作者: 陈文凯 Email: qc2008@fzu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 王志麟; 杨明; 郑企克. 配位体 SO_4^{2-} 对激发态铀(VI)去活化的影响[J]. 物理化学学报, 1993, 9(04): 569-574

扩展功能

本文信息

PDF(230KB)

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
文章反馈
浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 铀酰离子
▶ 密度泛函理论
▶ 相对论赝势
▶ 溶剂化
▶ 振动频率

本文作者相关文章

▶ 辜家芳
▶ 陆春海
▶ 陈文凯
▶ 许莹
▶ 郑金德