

论文

FONO₂低能激发态和光电子谱的理论研究

魏子章¹, 李步通¹, 潘清江², 张红星¹

1. 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春130023;
2. 黑龙江大学化学化工与材料学院, 哈尔滨 150080

摘要:

采用CASSCF方法和ANO-S基组计算了FONO₂分子及其阳离子的低能激发态, 并采用CASPT2方法进行能量校正. 预测了在低能激发态时FONO₂分子的几何结构发生了很大变化, 从基态的平面构型转变为空间的几何构型. 然而在阳离子中没有发生相似的几何构型改变. 此外, 在分子的基态几何构型下, 设计并计算了相应阳离子的垂直离子势, 对分子的光电子谱给出了详细的解释.

关键词: 硝酸氟 离子化势 激发态 CASSCF CASPT2

Theoretical Study on the Low-lying Electronic States and Ionization Spectra of Fluorine Nitrate

WEI Zi-Zhang¹, LI Bu-Tong¹, PAN Qing-Jiang², ZHANG Hong-Xing^{1*}

1. State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, China;
2. School of Chemistry and Material Science, Heilongjiang University, Harbin 150080, China

Abstract:

Using the complete active space self-consistent field(CASSCF) method with the atomic natural orbital (ANO) basis set, we studied the ground state and low-lying excited states of fluorine nitrate and its cation. The stable geometry of ground state was the planar structure with the C_s symmetry, but the stable structures of excited states were changed to the nonplanar structure. However, the similar change of the cation geometry was not observed. Furthermore, the vertical ionization potential of the fluorine nitrate molecular was studied on the basis of the optimized geometry of the ground state. Taking the dynamic correlation effects into account, we used the second-order perturbation(CASPT2) method to obtain more reliable energies. The assignment of the first two bands is in an excellent agreement with the experimental data and the theoretical results, but in the higher energy region, the different assignments were completed bass of the CASPT2 results.

Keywords: Fluorine nitrate Ionization potential Excited state CASSCF CASPT2

收稿日期 2006-03-31 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 张红星

作者简介:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(356KB)

[HTML全文](OKB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 硝酸氟

▶ 离子化势

▶ 激发态

▶ CASSCF

▶ CASPT2

本文作者相关文章

▶ 魏子章

▶ 李步通

▶ 潘清江

▶ 张红星

▶ 魏子章

▶ 李步通

▶ 潘清江

▶ 张红星

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

参考文献:

1. Cady G. H.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1934, 56: 2635—2637
2. Hill D. G., Bigelow L. A.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1937, 59: 2127—2128
3. Pauling L., Brockway L. O.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1937, 59: 13—20
4. Christe K. O., Schack C. J., Wilson R. D.. Inorg. Chem.[J], 1974, 13: 2811—2815
5. Odeurs R. L., Vander B. J., Herman M. A., *et al.* J. Mol. Struct.[J], 1984, 118: 81—88
6. Casper B., Dixon D. A., Mack H. G., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 1994, 116: 8317—8321
7. Peters N. J. S., Allen L. C.. Inorg. Chem.[J], 1988, 27: 755—758
8. Morris V., Walker G. A., Jones P., *et al.* J. Phys. Chem.[J], 1989, 93: 7071—7074
9. Smith B. J., Marsden C. J.. J. Comput. Chem.[J], 1991, 12: 565—574
10. Rayez M. T., Destriau M.. Chem. Phys. Lett.[J], 1993, 206: 278—284
11. Lee T. J.. J. Phys. Chem.[J], 1995, 99: 1943—1948
12. Casper B., Lambotte P., Minkwitz R., *et al.* J. Phys. Chem.[J], 1993, 97: 9992—9995
13. Graña A. M., Lee T. J., Gordon M. H.. J. Phys. Chem.[J], 1995, 99: 3493—3502
14. Zhou Z. Y., Du B. N., Fu A. P., *et al.* Inter. J. Quan. Chem.[J], 2003, 94: 44—50
15. Wang D. X., Jiang P., Zhang Q. Y.. Chem. Phys. Lett.[J], 1996, 262: 771—775
16. Ehara M., Ohtsuka Y., Nakatsuji H.. Chem. Phys.[J], 1998, 226: 113—123

本刊中的类似文章

1. 魏子章,李步通,潘清江,张红星.乙基溴及其阳离子的低能激发态从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1903-1906
2. 张玉华,夏宝辉,张红星.氮化钷配合物离子[OsN(mnt)₂]⁻的电子结构和光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 764-767
3. 李步通,魏子章,潘清江,张红星,孙家锺.HSO自由基电子基态激发态的CAS计算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1107-1109
4. 周欣,潘清江,李明霞,张红星,唐敖庆.三联吡啶Pt(II)配合物的基态和激发态的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 900-903
5. 潘清江,周欣,张红星,付宏刚.Au(I)电荷转移配合物光谱性质的从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 330-333
6. 李步通,魏子章,潘清江,张红星,孙家锺.HO₂自由基电子激发态的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2168-2170
7. 李步通,魏子章,潘清江,张红星,孙家锺.乙基硫自由基及阴、阳离子低电子激发态从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1972-1974
8. 魏子章,李步通,潘清江,张红星.OCIO里德堡态激发能的准确预测及其阴离子低能激发态的从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2183-2186
9. 周子彦,赵继阳,刘敏,苏忠民,谢玉忠,吴学.6-甲基-4-羟基嘧啶单体及二聚体激发态质子转移异构化反应及光谱的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2385-2389
10. 赵晓辉,梁俊,马菲,苏文杰,王鹏,付立民,艾希成,张建平.HL-LH2中色素分子间的单重激发态能量传递[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 149-153
11. 周欣,孟烜宇,李明霞,潘清江,张红星.配合物[N,N'-二(亚水杨基)-1,2-乙二胺]Pt(II)光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1239-1242
12. 魏子章,王贵昌,卜显和.联吡啶Ir(III)配合物电子结构及光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2393-2397
13. 蒋洁,孟素慈,马晶.二聚(2,5-噻吩乙烯撑)基态和激发态的电子结构:桥基和芳环取代的影响[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 370-376

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-	reviewuinc	edfwen@163.com	edwalle	Buy discount ugg cheap ugg shoes ugg ugg rainier boots ugg usa discount boots ugg 5825 shoes sale ugg su