

论文

Zn(II)/ γ -MnOOH体系化学吸附的密度泛函理论研究

夏树伟¹, 马骁楠^{1,2}, 于良民¹, 潘纲²

1. 中国海洋大学化学化工学院, 海洋化学理论与工程技术教育部重点实验室, 青岛 266003;
2. 中国科学院生态环境研究中心, 环境水质化学国家重点实验室, 北京 100085

摘要:

采用密度泛函B3LYP方法对Zn(II)在水锰矿(MnOOH)₂(H₂O)₆簇模型表面的水合、一级和二级水解三类共11种吸附构型进行了理论研究. 计算结果表明, 水合吸附构型的稳定性顺序为DC(双角)>SE-B(单边-B)>SE-A(单边-A)>DE(双边), 水解吸附构型的稳定性顺序为DC>SE-A>SE-B>DE, 均符合鲍林第三规则; 热化学分析结果说明, 其吸附和水解是相互制约的两个过程, 这一结论通过前线轨道理论分析得到了证明; 自然布居分析结果表明, 吸附过程中电子由簇模型向吸附质迁移; 结合电子供体-受体相互作用和前线轨道组成分析了吸附产物的稳定性.

关键词: 密度泛函理论 Zn(II) 水锰矿 吸附构型

DFT Study of Chemisorption of Zn(II)/ γ -MnOOH System

XIA Shu-Wei^{1*}, MA Xiao-Nan^{1,2}, YU Liang-Min¹, PAN Gang²

1. Key Laboratory of Marine Chemistry Theory and Technology, Ministry of Education, Chemistry and Chemical Engineering College, Ocean University of China, Qingdao 266003, China;
2. State Key Laboratory of Environmental Aquatic Chemistry, Research Center for Eco-Environmental Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China

Abstract:

Three kinds of adsorption species(hydrated, 1st hydrolysis and 2nd hydrolysis) in Zn(II)/ γ -MnOOH system were calculated with DFT-B3LYP method. The thermochemistry analysis indicate that the stability order of the adsorption species was DC>SE-B>SE-A>DE for the hydrated species, and DC>SE-A>SE-B>DE for hydrolysis species, which obeyed the 3rd law of Pauling. The adsorptive process and hydrolytic process always show an inter-antagonistic relationship in this system, which is also consistent with the frontier molecular orbital analysis. Natural population analysis indicate that electronic transfer from cluster model to Zn—O unit was occurred clearly during adsorptive process, which give a reasonable explanation for the stabilization of adsorption species combining with electronic donor-acceptor and frontier molecular orbital analysis.

Keywords: Density functional theory Zn(II) γ -MnOOH Adsorption configuration

收稿日期 2007-11-22 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 夏树伟

作者简介:

参考文献:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(519KB)

[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

▶ 密度泛函理论

▶ Zn(II)

▶ 水锰矿

▶ 吸附构型

本文作者相关文章

▶ 夏树伟

▶ 马骁楠

▶ 于良民

▶ 潘纲

▶ 夏树伟

▶ 马骁楠

▶ 于良民

▶ 潘纲

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

1. Pretorius P. J., Linder P. W., Appl. Phys. Chem. C[J], 2007, 16(9): 1067—1082
2. Xia S. W., Pan G., Cai Z. L., *et al.*. J. Phys. Chem. C[J], 2007, 111(28): 10427—10437
3. Laurence Bochatay, Per Persson, Staffan Sjöberg. J. Colloid Interface Sci. [J], 2000, 229(2): 584—592
4. Laurence Bochatay, Per Persson. J. Colloid Interface Sci. [J], 2000, 229(2): 593—599
5. Pan G., Qin Y. W., Li X. L., *et al.*. J. Colloid Interface Sci. [J], 2004, 271 (1): 28—34
6. Li X. L., Pan G., Qin Y. W., *et al.*. J. Colloid Interface Sci. [J], 2004, 271(1): 35—40
7. Randall S. R., Sherman D. M., Ragnarsdottir K. V., *et al.*. Geochim. Cosmochim. Acta[J], 1999, 63(19): 2971—2978
8. Caroline L. P., Sherman D. M.. Geochim. Cosmochim. Acta[J], 2004, 68(12): 2623—2637
9. Kristian W. P., James D. K., Donald L. S.. Environ. Sci. Technol. [J], 2006, 40(24): 7717—7742
10. Kristian W. P., Michael J. B., James D. K., *et al.*. Langmuir[J], 2005, 21(24): 11071—11078
11. Lorena T., Kideok D. K., Chad C. T., *et al.*. Environ. Sci. Technol. [J], 2006, 40(12): 3836—3841
12. Julia Sheals, Staffan Sjöberg, Per Persson. Environ. Sci. Technol. [J], 2002, 36(14): 3090—3095
13. XIA Shu-Wei(夏树伟), XU Xiang(徐香), YU Hong(于红), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报) [J], 2007, 28(4): 751—754
14. ZHU Meng-Qiang(朱孟强), PAN Gang(潘纲), HU Tian-Dou(胡天斗), *et al.*. Acta Phys. Chim. Sin.(物理化学学报) [J], 2005, 21(12): 1378—1383
15. ZHU Meng-Qiang(朱孟强), PAN Gang(潘纲), LI Xian-Liang(李贤良), *et al.*. Acta Phys. Chim. Sin.(物理化学学报) [J], 2005, 21(10): 1169—1173
16. Dachs H. Z.. Kristallogr. [J], 1963, 118: 303
17. QIAN Yi-Tai(钱逸泰). Introduction of Crystal Chemistry, 2nd ed.(结晶化学导论, 第2版) [M], Hefei: Press of University of Science and Technology of China, 2002: 237

本刊中的类似文章

1. 朱元强, 郭勇, 谢代前. 2-(2-甲基烯丙基)-3-(3-甲基-1,2-丁二烯基)环己-2-烯酮重排生成八元环化合物反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 385-388
2. 王鹏, 王大喜, 高金森, 董坤, 徐春明, 刘靖疆. 三氯化铝烷基氯化咪唑盐结构和红外光谱的模拟计算[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1505-1508
3. 陈建成, 邢小鹏, 唐紫超, 高振. 二元合金团簇 CoGe_n^- ($n=1\sim 12$)的结构和稳定性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 535-538
4. 温斌; 魏娜然; 马红军; 赵纪军; 李廷举. 新金刚石稳定性及晶体结构模型的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1332-1335
5. 李会学, 萧泰. 3-苯基-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑的电子结构和光谱性质的含时密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 747-750
6. 金莲姬, 张珉, 苏忠民, 史丽丽, 赵亮. 单壁碳纳米管内包含有机小分子(乙炔、乙烯和乙烷)结构的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 755-759
7. 李思殿, 任光明, 苗常青, 李栋东. 含有平面六配位碳的第二及第三过渡系金属夹心配合物密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 129-131
8. 曲雯雯, 谭宏伟, 刘若庄, 陈光巨. 侧链间氢键的协同效应对环状多肽自组装的影响[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 307-311
9. 赵丽娇, 钟儒刚, 戴乾圆. β -甲基亚硝基哌嗪致癌剂第二亲电中心邻基参与作用的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2386-2389
10. 石绍庆, 杨国春, 竅卓, 苏忠民. $[\text{M}_2\text{O}_m(\text{C}_{25}\text{N}_4\text{H}_{18}\text{O}_n)]^{2-}$ ($\text{M}=\text{W}, \text{Mo}; n=1, 2; m=17, 18$)的二阶非线性光学性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2398-2401
11. 李吉来, 杭焯超, 耿彩云, 黄旭日, 李方实, 孙家锺. 磺酰胺类化合物除草活性的QSAR研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 539-542
12. 沈福刚, 段文勇, 孙宏伟, 陈兰, 陈沛全, 赖城明, 李正名. 吡啶衍生物与碘甲烷反应的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2175-2178
13. 李建辉, 夏文生, 万惠霖. Nb^+ 离子活化甲烷脱氢反应机理密度泛函(DFT)研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2357-2361
14. 耿彩云, 李吉来, 孙广领, 黄旭日, 孙家锺. 金属 Ir_4 Cluster催化丙烯加氢反应势能面的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2372-2375
15. 孙仁安, 张旭, 韩克利. $\text{SiHCl}_3\text{-H}_2$ 气相外延生长Si单晶反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1695-1698
16. 徐定国, 鄢国森. L1 β -Lactamase催化反应机理研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2453-2456
17. 苏钎, 朱东霞, 仇永清, 陈徽, 王悦. 含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的Zn(II)配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1361-1364
18. 苏钎, 朱东霞, 仇永清, 陈徽, 王悦. 含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的Zn(II)配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1361-1364
19. 李岩, 封继康, 任爱民, 杨丽. 苄与苯并噻二唑共聚物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(8): 1561-1565
20. 申勇立, 郝金库, 曹映玉, 杨鞞?SUP>. 白藜芦醇清除羟基自由基夺氢机理的量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1743-1746

21. 赵树魁, 孙秀云, 方亮, 朱玉兰. 双核金属茂合物 $Zn_2(\eta^5-E_5)_2$ ($E=N, P, As, Sb$) 电子结构和三阶非线性光学性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(9): 1731-1734
22. 熊杰明, 龚良发, 李前树. 杂硼原子簇 B_6X^- ($X=N, P, As, Sb, Bi$) 稳定性和芳香性研究[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(10): 1968-1971
23. 杨静, 张绍文, 李前树. CH_nF_{4-n} 与 O_3 吸氢反应途径和速率常数计算[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(10): 1975-1977
24. 李明霞, 周欣, 潘清江, 张红星, 付宏刚, 孙家锺. 联吡啶钌配合物 $[Ru(Htcterpy)X_3]^3-$ [$X=NCS, CN, Cl$] 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(12): 2377-2380
25. 王嵩, 于健康, 丁大军, 孙家锺. $NO+HCCCO$ 反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(1): 170-173
26. 王继芬, 封继康. 二苄及其衍生物的结构优化、前线轨道及其性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(1): 177-181
27. 艾纯芝, 孙仁安, 王长生, 马琳, 杨凌. 己烷催化异构化反应中氢溢流机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(1): 182-186
28. 丁秀丽, 吴剑鸣, 徐昕. 一些密度泛函方法预测电子亲和势[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(2): 396-398
29. 王岩, 方德彩, 刘若庄. Lewis碱稳定的硼代苯与亲二烯体的Diels-Alder反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(5): 1005-1010
30. 常青, 吴水星, 阚玉和, 杨双阳, 滕云雷, 杨国春, 苏忠民. 硅杂环戊二烯衍生物电子结构与光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(5): 1011-1015
31. 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
32. 周中军, 刘慧玲, 黄旭日, 孙家锺. 预测 $[C, O, S]$ 体系的稳定异构体[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(8): 1641-1643
33. 纪艺琼, 王墨焱, 王兰芬, 包鹏, 刘扬. 稳定直线型硝酸根- O_2^- 加合物的构型因素解析[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(9): 1801-1803
34. 陈健, 谭凯, 林梦海, 张乾二. 过渡金属氧化物 $(M_2O_5)^+$ ($m=1, 2$) ($M=V, Nb, Ta$) 与 C_2H_4 气相反应机理的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(9): 1821-1825
35. 刘晓东, 于艳波, 仇永清, 孙世玲, 陈徽, 苏忠民, 王荣顺. 十二顶点邻位双取代碳硼烷衍生物二阶NLO性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(9): 1816-1820
36. 范建训, 任爱民, 封继康, 薄冬生. 7-氮杂吡啶衍生物分子基态和激发态性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006, 27(6): 1091-1095
37. 裘云锋, 曹泽星. 分子内结构环境对解离能的影响[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2489-2491
38. 王一, 王永, 韩克利. 非血红素配合物 $[FeIV(O)(TMC)(NCMe)]_2+$ 与 $[FeIV(O)(TMCS)]_+$ 的几何结构、电子结构、成键性和反应活性比较[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2469-2473
39. 彭亮, 丁万见, 于建国, 刘若庄. 硫代乙酰胺光化学反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2462-2468
40. 武光军, 王鑫, 于爱敏, 王贵昌, 杨雅莉, 章福祥, 关乃佳. 含氮ZSM-5分子筛骨架中氮取代位置的密度泛函计算[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2403-2406
41. 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
42. 蒋帆, 吴云东. 最短 α -螺旋的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2371-2376
43. 张成华, 薛英, 郭勇, 鄢国森. N, N' -二(对氟苄基)- N' -(2', 3'-二脱氧-3'-硫代胞苷) 甲脒水解反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2354-2359
44. 田凯, 涂学炎, 戴树珊. 在 $Rh(111)$ 面上 $NO+CO$ 反应机理的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2360-2364
45. 谭凯, 吕鑫, 林梦海, 张乾二. 正、负和中性 $TiP10$ 团簇结构与电子性质的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2350-2353
46. 任杰, 王炳武, 陈志达, 徐光宪. 密度泛函理论在分子磁学中的应用——混合价三核锰配合物磁性的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2331-2336
47. 徐文国, 白王军, 卢士香. SeH_n/SeH_n^- ($n=1\sim 5$) 的结构、热化学及电子亲合能研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(11): 2281-2288
48. 苏钊, 朱东霞, 仇永清, 陈徽, 王悦. 含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的 $Zn(II)$ 配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(7): 1361-1364
49. 罗琼, 李前树. 配位不饱和双核钌羰基化合物 $Ru_2(CO)_n$ ($n=7, 6$) 的DFT计算研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2430-2434
50. 刘莉, 朱荣秀, 张冬菊, 刘成卜. 甲醇协助丙交酯开环聚合反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008, 29(12): 2420-2424
51. 苏钊, 朱东霞, 仇永清, 陈徽, 王悦. 含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的 $Zn(II)$ 配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(7): 1361-1364
52. 覃昊, 李欣, 孟祥丽, 强亮生. O_3 分子在 $CuO(110)$ 面吸附的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009, 30(1): 164-169
53. 阚玉和, 李强. C_{62} 及其吡啶衍生物结构与电子光谱的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009, 30(1): 174-177
54. 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

55. 马海霞, 严彪, 宋纪蓉, 吕兴强, 王连江. DNAZ 酰基衍生物的分子结构及量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 377-381

56. 杨玉环, 潘纲, 马骁楠, 陈灏, 张美一, 何广智, 李薇. Zn(II) 在 TiO_2 表面上的微观吸附模式研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 387-390

57. 薛严冰, 唐祯安. CO 在 SnO_2 (110) 面吸附特性的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 583-587

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-11-16	frsahfkjsdagjk	hsjkafh@sdk.com	ugg boots	Ugg Boots Sale Online Ugg Boots Discount Uggs Di Ugg Ugg Shoes S: Sale Cheap Ugg Cheap Uggs ugg