

论文

SeH_n/SeH_n⁻ (n=1~5)的结构、热化学及电子亲合能研究

徐文国, 白王军, 卢士香

北京理工大学理学院, 北京 100081

摘要:

选用7种不同的密度泛函理论(DFT)方法: B3LYP, BLYP, B3LYP, BP86, B3P86, BPW91, B3PW91, 采用全电子的双ζ加极化加弥散函数基组(DZP++), 对SeH_n/SeH_n⁻ (n=1~5)的分子结构、电子亲合能和第一离解能进行了研究。结果表明, SeH/SeH⁻, SeH₂/SeH₂⁻, SeH₃/SeH₃⁻, SeH₄/SeH₄⁻和SeH₅/SeH₅⁻的基态结构分别为C_{∞v}/C_{∞v}['], C_{2v}(¹A₁)/C_s(²A₁), C_s(²A₁)/C_{2v}(¹A₁), C_{2v}(¹A₁)/C_{4v}(²A₁), C_{4v}(²A₁)/C_{4v}(¹A₁), 其中, B3P86和B3PW91在预测分子结构方面比较好; 在电子亲合能方面, BLYP方法预测是最可靠的; BP86方法预测的谐振频率与实验值接近; B3LYP能很好的预测第一离解能。

关键词: 硒氢化合物 分子结构 电子亲合能 密度泛函理论 双ζ加极化加弥散基组

Structures, Thermochemistry and Electron Affinities of the Selenium Hydrides

SeH_n/SeH_n⁻ (n=1—5)

XU Wen-Guo*, BAI Wang-Jun, LU Shi-Xiang

School of Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

Abstract:

Seven different density functional theory(DFT) methods were employed to predict the molecular structures, electron affinities, and first dissociation energies of the SeH_n/SeH_n⁻ (n=1—5) molecules. The three type of electron affinities reported in this work are the adiabatic electron affinity(E_{Aad}), the vertical electron affinity(E_{Avert}), and the vertical detachment energy(VDE). The basis set used is of double-ζ plus polarization quality with additional s- and p-type diffuse functions, labeled as DZP++. The ground states of SeH/SeH⁻, SeH₂/SeH₂⁻, SeH₃/SeH₃⁻, SeH₄/SeH₄⁻ and SeH₅/SeH₅⁻ are C_{∞v}/C_{∞v}['], C_{2v}(²A₁)/C_s(²A₁), C_s(²A₁)/C_{2v}(¹A₁), C_{2v}(¹A₁)/C_{4v}(²A₁), C_{4v}(²A₁)/C_{4v}(¹A₁), respectively. Compared with the experimental values, the B3P86 and B3PW91 methods give good results for the molecular structures, the BLYP method in all of these schemes is the best in respect of predicting electron affinities, the BP86 method determines the vibrational frequencies in best agreement with experimental data, meanwhile, the B3LYP methods gives good results for the first dissociation energies.

Keywords: Selenium hydride Molecular structures Electron affinities Density functional theory (DFT) Double-ζ plus polarization basis set augmented with diffuse s- and p-type functions(DZP++)

收稿日期 2007-12-03 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 徐文国

作者简介:

参考文献:

1. DU Ming(杜明), ZHAO Lei(赵镭), LI Chao-Rui(李朝睿), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2007, 28(1): 75—78
2. Ulenikov O. N., Bekhtereva E. S., Sanzharov N. A., *et al.*. J. Mol. Spectrosc.[J], 2004, 227: 1—12

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(582KB)

[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

- ▶ 硒氢化合物
- ▶ 分子结构
- ▶ 电子亲合能
- ▶ 密度泛函理论
- ▶ 双ζ加极化加弥散基组

本文作者相关文章

- ▶ 徐文国
- ▶ 白王军
- ▶ 卢士香
- ▶ 徐文国
- ▶ 白王军
- ▶ 卢士香

PubMed

- Article by
- Article by
- Article by
- Article by
- Article by
- Article by

3. Jensen P., Kozin I. N.. J. Mol. Spectrosc.[J], 1993, 160(1): 39—57
4. Binning R. C., Curtiss L. A.. J. Chem. Phys.[J], 1990, 92(6): 3688—3692
5. Binning R. C., Curtiss L. A.. J. Chem. Phys.[J], 1990, 92(3): 1860—1864
6. Scott Y., Angela K. W.. J. Chem. Phys.[J], 2005, 122(17): 174310—174324
7. Smyth K. C., Braumant J. I.. J. Chem. Phys.[J], 1972, 56(12): 5993—5997
8. Gibson S. T., Green J. P., Berkowitz J.. J. Chem. Phys.[J], 1986, 85(9): 4815—4824
9. Ortiz J. V.. J. Chem. Phys.[J], 1987, 87(3): 1701—1704
10. Ram R. S., Bernath P. F.. J. Mol. Spectrosc.[J], 2000, 203 : 9—15
11. Hunzinger S.. J. Chem. Phys.[J], 1965, 42(4): 1293—1302
12. Dunning T. H.. J. Chem. Phys.[J], 1970, 53(7): 2823—2833
13. Brown S. T., Rienstra-Kiracofe J. C., Schaefer H. F.. J. Chem. Phys. A[J], 1999, 103(20): 4065—4077
14. Frisch M. J., Trucks G. W., Schegel H. B., *et al.*. Gaussian 98, Revision A07[CP], Pittsburgh, PA: Gaussian Inc., 1998
15. Huber K., Herzberg G.. Molecular Spectra and Molecular Structure, Chapter 4, Constants of Diatomic Molecules[M], Princeton: Van Nostrand, 1979
16. Stoneman R. C., Larson D. J.. Phys. Rev. A[J], 1987, 35(7): 2928—2935
17. Callomon J. H., Hirota E., Kuchitsu K., *et al.*. Structure Data of Free Polyatomic Molecules, Vol.7 [M], Berlin: Springer, 1976
18. Shimanouchi T.. Tables of Molecular Vibrational Frequencies Natl. Stand. Ref. Data Ser., Vol.39 [M], Washington D.C.: Natl. Bur. Stand, 1972

本刊中的类似文章

1. 周鹏,梅虎,田菲菲,李志良. 新型三维原子场全息相互作用矢量用于几类典型药物体系的QSAR研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1027-1030
2. 王秀月,王同华,宋成文,曲新春. 前驱体分子结构对聚糠醇基碳膜微结构及气体分离性能的影响[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1143-1146
3. 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
4. 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
5. 陈建成,邢小鹏,唐紫超,高振. 二元合金团簇 $\text{CoGe}^-(n=1\sim 12)$ 的结构和稳定性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 535-538
6. 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
7. 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
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 -甲基亚硝基咪唑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,窦卓,苏忠民. $[\text{M}_m\text{O}_m(\text{C}_{25}\text{N}_4\text{H}_{18})_n]^{2-}$ ($\text{M}=\text{W}, \text{Mo}; n=1, 2; m=17, 18$)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,孙家锤. 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. 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
13. 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
14. 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
15. 李岩,封继康,任爱民,杨丽. 芴与苯并硒化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
16. 申勇立,郝金库,曹映玉,杨鞞?SUP>. 白藜芦醇清理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
17. 熊杰明,龚良发,李前树. 杂硼原子簇 B_6X^- ($\text{X}=\text{N}, \text{P}, \text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}$)稳定性和芳香性研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1968-1971
18. 杨静,张绍文,李前树. $\text{CH}_n\text{F}_{4-n}$ 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
19. 王晓春,张磊,宫清涛,王琳,张路,李振泉,赵滩,俞稼镛. 不同结构烷基苯磺酸钠水溶液的泡沫性能及动态表面张力[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2118-2123
20. 李明霞,周欣,潘清江,张红星,付宏刚,孙家锤. 联吡啶钌配合物 $[\text{Ru}(\text{Htcterpy})\text{X}_3]^{3-}$ ($\text{X}=\text{NCS}, \text{CN}, \text{Cl}$)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
21. 王嵩,于健康,丁大军,孙家锤. $\text{NO}+\text{HCCCO}$ 反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 170-173

22. 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
23. 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
24. 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
25. 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
26. 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
27. 聂小琴,徐文国,卢士香. 钒、铬团簇的电子亲合能、硬度与原子数的关系[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1629-1634
28. 纪艺琼,王墨焱,王兰芬,包鹏,刘扬. 稳定直线型硝酸-O₂⁻加合物的构型因素解析[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1801-1803
29. 陈健,谭凯,林梦海,张乾二. 过渡金属氧化物(M₂O₅)⁺ (M=V, Nb, Ta)与C₂H₄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
30. 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
31. 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
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 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
37. 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
38. 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
39. 郭丽丽,许春丽,李保新,吕家根. 生物活性化合物液相直接化学发光特性的理论预测[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1043-1048
40. 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
41. 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
42. 覃昊,李欣,孟祥丽,强亮生. O₃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
43. 阚玉和,李强. C₆₀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
44. 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
45. 马海霞,严彪,宋纪蓉,吕兴强,王连江. DNAZ酰基衍生物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
46. 杨玉环,潘纲,马晓楠,陈灏,张美一,何广智,李薇. Zn(II)在TiO₂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
47. 薛严冰,唐祯安. CO在SnO₂(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
----	----	-----	----	----	----

ugg online
ugg boot
online buy
ugg boots
sale
ugg boots
cardy
ugg boots
cardy tall
ugg
ugg boots
ugg knightsb