

气相硝酸及过氧亚硝酸的结构和光电子能谱

裴克梅; 李益民; 阚瑞峰; 罗晓琳; 李海洋

中国科学院安徽光学精密机械研究所, 环境光谱学研究实验室, 合肥 230031

摘要:

采用了B3LYP方法和6-311G(d) 基组, 并辅以MP2方法详细地计算了硝酸(HONO₂)和过氧亚硝酸(HOONO)及相应正离子的各种可能构象、能量、振动频率等, 分析了它们的相对稳定性、电离势、光电子能谱, 探讨了用光电子能谱去探测HOONO的可能性. 结构优化结果表明, HOONO和HOONO⁺均有三种稳定的构象, HOONO有三个一阶鞍点的结构. 作出了HOONO和HOONO⁺的能量随O—O键旋转的变化曲线图, 定性地讨论了可能存在的物种以及各构象之间几何结构的变化.

关键词: 平衡结构 构象 光电子能谱 HONO₂ HOONO 理论计算

收稿日期 2002-05-06 修回日期 2002-07-29 网络版发布日期 2003-01-15

通讯作者: 李海洋 Email: hli@aiofm.ac.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1354KB\)](#)

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

▶ [平衡结构](#)

▶ [构象](#)

▶ [光电子能谱](#)

▶ [HONO₂](#)

▶ [HOONO](#)

▶ [理论计算](#)

本文作者相关文章

▶ [裴克梅](#)

▶ [李益民](#)

▶ [阚瑞峰](#)

▶ [罗晓琳](#)

▶ [李海洋](#)