

硅氧团簇(SiO₂)_nO₂H₄的密度泛函理论研究

徐灿; 朱莉芳; 高晨阳; 曹娟

兰州大学物理科学与技术学院, 兰州 730000; 磁学与磁性材料教育部重点实验室, 兰州 730000

摘要:

提出硅氧团簇(SiO₂)_nO₂H₄的两种新构型: 基于笼状结构和环状结构的构型, 并与链状构型相比较, 用密度泛函理论的B3LYP方法在6-31G(d)基组水平上计算了三种构型n=2~22(n取偶数)的几何结构、平均结合能、能隙以及能量的二次差分. 分析计算结果发现, 笼状构型不但在n=4和8处存在幻数团簇(实验上已经观察到), 而且预测在n=14处也存在类似的幻数团簇; 此外, 与(SiO₂)_n团簇不同的是, (SiO₂)_nO₂H₄团簇的环状构型的稳定性从n=4开始大于链状构型, 意味着水的加成对硅氧团簇的稳定性有着重要的影响.

关键词: 团簇 幻数 密度泛函理论 结构 机理

收稿日期 2005-07-21 修回日期 2005-09-16 网络版发布日期 2006-01-22

通讯作者: 徐灿 Email: cxulzu@yahoo.com

本刊中的类似文章

1. 郭彩红; 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga_xP_y (x+y=8)及其阴离子团簇的结构与性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1253-1259
2. 盛六四; 齐飞; 高辉; 罗志勇; 张允武. C₂H₃Cl分子团簇内部离子-分子反应产生C₄H₅Cl⁺的研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 1004-1007
3. 马晨生; 李海洋; 张晓光; 白吉玲; 王秀岩; 张桂秋; 王利; 何国钟; 楼南泉. 铜氧团簇负离子的产生[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 185-189
4. 史扬; 高振; 朱起鹤; 孔繁敖. 气相中原子分子成簇动力学 I. 动力学基本模型[J]. 物理化学学报, 1996, 12(03): 196-201
5. 胡义华; 王小涓; 詹业宏; 宁铎; 陈丽; 刘美希; 陆文云; 杨世和. Van der Waals团簇o-xylene N₂的共振双光子电离光谱[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 289-292
6. 王丽; 杨华; 边秀房; 李喜珍. 自由表面的Ni原子团簇的熔化[J]. 物理化学学报, 2001, 17(12): 1097-1101
7. 李玥; 王秀岩; 张晓光; 李连斌; 楼南泉; 盛六四; 张允武. van der Waals团簇ArHCl的光电离研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 322-327
8. 郭向云. 钼团簇形成和增长机理的Monte Carlo研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(02): 174-176
9. 张霞; 唐紫超; 高振. 锗分族元素二元团簇及其与Co形成的团簇离子[J]. 物理化学学报, 2003, 19(01): 4-8
10. 于忠德; 张南; 高振; 孔繁敖; 朱起鹤. 铜硫团簇离子的形成与光解[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 97-99
11. 张南; 于忠德; 冯万永; 武小军; 高振; 朱起鹤; 孔繁敖. 含氢碳原子团簇的初步研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 126-129
12. 张南; 于忠德; 武小军; 高振; 朱起鹤; 孔繁敖. 钼硫原子簇的形成及激光裂解的初步研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(01): 44-49
13. 李海洋; 马晨生; 白吉玲; 何国钟. Mn/O团簇负离子的组成规律及增长机理[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 946-949
14. 张小岗; 郭向云; 钟炳; 彭少逸. 甲醇在超临界环己烷中形成簇团的Monte Carlo初探[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 898-903
15. 李海洋; 马晨生; 白吉玲; 何国钟. 样品价态对激光气化产生Cu/Cl团簇的组成和稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 933-937
16. 马文瑾; 武海顺. Al_mN₂⁻ (m=1~8)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 178-182
17. 邵士勇; 李海洋; 罗晓琳; 肖雪; 牛冬梅; 温丽华; 王宾; 梁峰; 侯可勇. 乙腈团簇增强的激光高价电离现象的质谱研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1113-1116
18. 张材荣; 陈宏善; 陈玉红; 冯旺军; 李维学; 许广济; 寇生中. Al₈P₈团簇环状结构与性质的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1368-1372
19. 宋燕; 陈宏善; 张材荣; 王广厚. (BN)_n (n≤12)团簇的结构及成键性质[J]. 物理化学学报, 2005, 21(07): 735-739
20. 刘让苏; 刘凤翔; 董科军; 郑采星; 刘海蓉; 彭平; 李基永. 液态金属Al凝固过程中的团簇结构与幻数特性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1093-1098
21. 吕瑾; 许小红; 武海顺. Co_n (n=2~10)团簇的结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1118-1122

扩展功能

本文信息

PDF(708KB)

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

▶ 团簇

▶ 幻数

▶ 密度泛函理论

▶ 结构

▶ 机理

本文作者相关文章

▶ 徐灿

▶ 朱莉芳

▶ 高晨阳

▶ 曹娟

22. 白玉林;陈向荣;杨向东;芦鹏飞.硫团簇 S_n ($n=2\sim 8$)结构的朗之万分子动力学计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1102-1107
23. 牛冬梅;张树东;张先焱;李海洋.激光溅射Cu等离子体与气相 C_2H_5OH 团簇的反应[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1114-1118
24. 马文瑾;武海顺. Al_mN_2 ($m=1\sim 8$)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 290-295
25. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平. NaP_4 及其正负离子的结构和光谱性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 670-674
26. 吕瑾;许小红;武海顺. $(CoCr)_n$ ($n=1-5$)合金团簇的结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1252-1256
27. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺. C_nAl_2 ($n=1-10$)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1477-1480
28. 罗小艳;贾文红;张聪杰. In_nNa 和 In_nNa^+ ($n=2-8$)的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 261-266
29. 张妍宁;王丽;边秀房.中介尺度Au纳米团簇熔化的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 35-39
30. 沈少来;唐景昌;曹松;汪雷.Cl/GaAs(111)表面近边X射线吸收精细结构的多重散射研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(11): 1054-1058
31. 马文瑾;武海顺. Al_mN ($m=2\sim 9$)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 927-932
32. 刘守新;孙承林.负载Ag对 TiO_2 界面光生电子转移效率的影响[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 621-625
33. 王利江;张聪杰;武海顺. C_nB^δ ($\delta=0, \pm 1; n=1\sim 6$)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
34. 陈文武;高毅勤;吴国胜;杨达林;盛六四;武国华;叶为全;张允武.六氢吡啶团簇的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(12): 1067-1070
35. 马晨生;李海洋;白吉玲;何国钟.幻数团簇离子 Mn^+_5 [J]. 物理化学学报, 1996,12(10): 926-928
36. 许宗荣;高艳玲. Si_4+Si_3 反应动力学: 振动激发态对反应的影响[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 396-399
37. 杨忠志 刘永军.精密从头算与ABEEM/MM模型对水团簇(H_2O) $_{1-9}$ 9种低能结构的计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 928-934
38. 葛桂贤, 唐光辉, 井群, 罗有华.CO与 Pd_n ($n=1-8$)团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
39. 李向富;陈宏善;孟凡顺;刘百幸. $(AgI)_n$ 团簇熔化行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 103-106
40. 陈莹;王秀英;赵俊卿.小尺寸金属团簇熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2042-2046
41. 葛桂贤 罗有华 张建玮.FMBe $_n$ (FM=Fe, Co, Ni; $n=1-12$)团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1891-1896
42. 雷雪玲;祝恒江;王先明;罗有华.用密度泛函理论研究 Zr_nB ($n=1-13$)团簇的结构及性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1655-1661
43. 邱玮玮;林梦海.过渡金属团簇 Nb_n 、 Co_n ($n\leq 4$)和 Nb_xCo_y ($x+y\leq 8$)的芳香性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1573-1578
44. 张强;杨忠志.水分子团簇分子力场方法的比较研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1565-1571
45. 姜勇;储伟;江成发;王耀红. Pd_n ($n=1-7$)团簇及其与甲烷相互作用的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1723-1727
46. 熊海灵;袁勇智;李航;朱华玲;蒋先军.长程范德华力导向作用下胶体凝聚的计算机模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1241-1246
47. 王艳宾;马文瑾;张静 武海顺. C_nAl ($n=2-11$)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 873-876
48. 黄卡玛;贾国柱;杨晓庆.微波频率下氯化钠溶液电导率的非线性特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 20-24
49. 张静;王艳宾;武海顺. $(BCO)_n^+$ ($n=1-12$)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 733-737
50. 吴国胜;高毅勤;陈文武;杨达林;盛六四;武国华;叶为全;张允武.四氢呋喃的同步辐射光电离研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(02): 188-192
51. 王丽;衣粟;边秀房. Ni_3Al 合金液态与非晶中的原子团簇 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 297-301
52. 曾祥华;徐秀莲;王锋;张丰收.新团簇形成的动力学研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 26-29
53. 梁汉东;刘敦一.金-硫团簇负离子组成特征的探讨 [J]. 物理化学学报, 2001,17(09): 859-864
54. 蔡永;朱熙文;颜昱;陈永泰;高克林.过渡金属团簇 M^+_2 ($M=Fe, Co, Ni$)与CO的化学反应[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 162-166
55. 刘剑波;韩春英;郑卫军;高振;孔繁放.铅、硫团簇的形成、反应与光解[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 22-27
56. 韩春英;刑小鹏;张霞;高振;朱起鹤.铁、钴、镍/磷二元团簇离子的形成与光解[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 818-824
57. 李月;胡勇军;吕日昌;王秀岩. $C_4H_5N-(NH_3)_n$ 氢键团簇的多光子电力与从头计算[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 810-817

58. 王诚;刘磊;李郁芬. $(\text{SiO}_2)_n$ 团簇的基态能量和结构[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 143-149
59. 王利江;张聪杰. B_2C_n^+ ($n=1\sim 9$)团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
60. 曹玉群;黄荣彬;郑兰荪.激光溅射下原子团簇生长的非平衡动力学[J]. 物理化学学报, 1999,15(04): 345-350
61. 石土金;刘力;杨达林;朱起鹤.1,4-二氧六环和氨分子氢键团簇的从头算[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 416-421
62. 曹玉群;黄荣彬;郑兰荪.激光溅射下原子团簇生长的非平衡动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 621-626
63. 刘剑波;韩春英;曾嵘;高振;朱起鹤.硅、锗、锡、铅/磷二元原子团簇的形成、光解和结构[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 883-889
64. 郑化桂;曾京辉;梁家和;刘方新.溶剂化团簇银的制备及表征[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 980-985
65. 刘鹏;曾嵘;高振;朱起鹤.银和硫团簇的反应[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 93-95
66. 胡义华;刘美希;王小涓;周金运;杨新;杨世和.两聚物 $(\text{C}_6\text{H}_5\text{F})_2^+$ 的光解离光谱[J]. 物理化学学报, 1999,15(12): 1057-1059
67. 钱萍;杨忠志.应用ABEEM/MM模型研究水分子团簇 $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=11\sim 16$)的性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 561-568
68. 陈莹;边秀房;孙民华;王丽.铝原子Bernal多面体团簇的理论研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 242-245
69. 张树东;朱湘君;王艳;孔祥和.甲醇团簇的多光子电离质谱及其从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 379-383
70. 史扬;张南;高振;朱起鹤;孔繁放.铝硫二元团簇的组分及其光解规律[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 299-301
71. 马文瑾;王艳宾;张静;武海顺. BmN ($m=2\sim 9$)团簇结构的特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 169-172