

过氧硝酸溶液拉曼谱的理论研究

Theoretical Study on Raman Spectra of Aqueous Peroxynitric Acid

摘要点击 209 全文点击 94 投稿时间: 2011-10-4 采用时间: 2011-10-14

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/625-630

中文关键词 [过氧硝酸溶液](#) [拉曼](#) [理论](#)

英文关键词 [Aqueous peroxynitric acid](#) [Raman](#) [Theoretical study](#)

基金项目

| 作者 | 单位 | E-mail |
|----------------------|--|--|
| 韦文美 | 安徽医科大学基础医学院化学教研室, 合肥230032 | |
| 郑仁慧* | 中国科学院化学研究所分子动态与稳态国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京10019 | zrh@iccas.ac.cn |
| 景园园 | 中国科学院化学研究所分子动态与稳态国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京10019 | |
| 刘雅婷 | 安徽医科大学基础医学院化学教研室, 合肥230032 | |
| 胡骏程 | 安徽医科大学基础医学院化学教研室, 合肥230032 | |
| 叶勇 | 安徽医科大学基础医学院化学教研室, 合肥230032 | |
| 史强* | 中国科学院化学研究所分子动态与稳态国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京10019 | zrh@iccas.ac.cn |

中文摘要

使用密度泛函理论和极化连续模型, 研究了过氧硝酸溶液的拉曼谱. 理论谱图和实验吻合得较好. 计算结果表明溶剂化效应对从基态到激发电子态的电偶跃迁矩和拉曼极化率有较大的影响. 从实验退偏比, 可以推断过氧硝酸不是平面分子. 另外, 还发现氢键可以使过氧硝酸氧氢键的红外强度增加许多倍.

英文摘要

Using density functional theory and polarizable continuum models, we study the Raman spectra of aqueous peroxynitric acid. The calculated results indicate that the solvent effect has significant influence on the electric dipole transition moments between the ground and excited electronic state and Raman polarizabilities. The theoretical Raman spectra agree well with the experimental results. From the experimental depolarization ratio, we can conclude that peroxynitric acid is not a plane molecule. We also find that the hydrogen bond can enhance IR intensity of hydroxyl group by several times.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计