

光谱学与光谱分析

$M^+AsF_6^-$  ( $M=Li, Na, K, Rb$ 和 $Cs$ )离子对的结构和振动光谱

轩小鹏,王键吉\*,赵培正

河南师范大学化学与环境科学学院,河南 新乡 453007

收稿日期 2007-5-10 修回日期 2007-8-20 网络版发布日期 2008-12-26

**摘要** 利用*ab initio*计算方法研究了 $AsF_6^-$ 阴离子和 $M^+AsF_6^-$  ( $M^+=Li^+, Na^+, K^+, Rb^+$ 和 $Cs^+$ )直接接触离子对的结构和光谱行为。结果表明,具有 $C_{3v}$ 结构三齿相互作用的 $M^+AsF_6^-$ 最稳定,二齿配位的结构只有在特定条件下才可能稳定存在。当形成离子对后,阳离子与 $AsF_6^-$ 的相互作用将改变 $AsF_6^-$ 的结构,这其中 $Li^+$ 的影响最大。另外, $AsF_6^-$ 光谱的变化可用来指认溶液中离子的缔合和离子对的种类。

**关键词** [直接接触离子对](#) [六氟砷酸盐](#) [振动光谱](#) [从头计算](#)

分类号 [O641.1](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2008\)12-2890-05](#)

通讯作者:

王键吉 [Jwang@henannu.edu.cn](mailto:Jwang@henannu.edu.cn)

#### 扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(737KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“直接接触离子对”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [轩小鹏](#)

· [王键吉](#)