

研究论文

LDHs主体层板与卤素阴离子超分子作用的理论研究

倪哲明; 潘国祥; 王力耕; 陈丽涛

浙江工业大学化学工程与材料学院, 催化新材料研究室, 杭州 310032

摘要:

构建了LDHs主客体作用模型, 采用混合密度泛函B3LYP方法, 在6-31G(d)水平上进行结构优化和频率分析, 然后分别用6-31G(d)和6-311++G(d, p)基组计算主客体相互作用能, 从几何参数、电荷布居、前线轨道、能量以及热力学参数等角度探讨LDHs主体层板与卤素阴离子(F<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>)间的超分子作用. 计算结果表明, LDHs主体层板复合卤素阴离子是一个自发过程. LDHs主客体间存在着较强的超分子作用, 主要包括静电和氢键作用, 相互作用能分别为-592.45和-444.01 kJ·mol<sup>-1</sup>. LDHs主体层板与卤素阴离子的前线轨道发生作用, 电子容易从卤素阴离子的HOMO向层板的LUMO转移, 形成的组装产物Mg<sub>6</sub>Al(OH)<sub>14</sub>+F<sup>-</sup>比Mg<sub>6</sub>Al(OH)<sub>14</sub>+Cl<sup>-</sup>稳定.

关键词: 阴离子型层状结构材料 超分子作用 密度泛函方法

收稿日期 2006-04-26 修回日期 2006-06-06 网络版发布日期 2006-11-06

通讯作者: 倪哲明 Email: jchx@zjut.edu.cn; pgxzjut@sohu.com

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(328KB)

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

- ▶ 阴离子型层状结构材料
- ▶ 超分子作用
- ▶ 密度泛函方法

本文作者相关文章

- ▶ 倪哲明
- ▶ 潘国祥
- ▶ 王力耕
- ▶ 陈丽涛