

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

As(V)/TiO₂、Zn(II)/TiO₂体系电子结构的密度泛函研究

马骁楠^{1,2}, 夏树伟¹, 于良民¹, 潘纲²

1. 中国海洋大学海洋化学理论与工程技术教育部重点实验室, 青岛 266003;
2. 中国科学院生态环境研究中心环境水质学国家重点实验室, 北京 100085

摘要:

用密度泛函方法对As(V)和Zn(II)在TiO₂表面以双角、单角和单边方式化学吸附物种的电子结构特征进行了研究。发现As(V)和Zn(II)在TiO₂表面发生吸附时具有不同的微观机制: As(V)与表面氧原子通过As—O σ键形成较为紧密的结合, Zn(II)仅通过孤对电子和外层空轨道与表面进行电子交换形成较弱的结合, As-TiO₂吸附体系的电子离域程度高于Zn-TiO₂体系。这种微观结合机制上的不同导致了两个体系在振动光谱、电荷分布和前线轨道组成等方面的差异。

关键词: As(V); Zn(II); 电子结构; 密度泛函

DFT Study of the Electronic Structure in As(V), Zn(II)/TiO₂ System

XIA Shu-Wei¹, MA Xiao-Nan^{1,2}, YU Liang-Min¹, PAN Gang^{2*}

1. Key Laboratory of Marine Chemistry Theory and Technology, Ministry of Education, Ocean University of China, Qingdao 26600, China;
2. State Key Laboratory of Environmental Aquatic Chemistry, Research Center for Eco-Environmental Science, Chinese Academy of Science, Beijing 100085, China

Abstract:

Adsorbed species(DC double corner, SC single corner and SE single edge) in As(V)-TiO₂ and Zn(II)-TiO₂ system were calculated with DFT method to describe their electronic structural characters. The natural bond orbital analysis indicate that some obvious differences of the adsorption bonding mechanism were existed between As(V) and Zn(II) species on TiO₂ surface. For As(V), it tend to form stable As—O σ bond with O atom of TiO₂ surface, but Zn(II) always link with surface in a incompact style. The differences make the electronic delocalized degree of As(V) adsorbed species being higher than Zn(II), and it further results in a series differences with two system: vibrational spectra, charge distribution and the component of frontier orbital, *etc.*

Keywords: As(V); Zn(II); Electronic structure; Density functional theory

收稿日期 2009-07-28 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20677053)和新世纪优秀人才支持计划(批准号: 070783)资助。

通讯作者: 潘纲, 男, 教授, 主要从事分子环境化学研究. E-mail: gpan@mail.rcees.ac.cn

作者简介:

参考文献:

- [1] Pretorius P. J., Linder P. W.. Appl. Geochem.[J], 2001, 16: 1067—1079
- [2] Bruce A. M., Scott E. F., Sabine G.. Environ. Sci. Technol.[J], 1998, 32: 2383—2388
- [3] David M. S., Simon R. R.. Geochim. Cosmochim. Acta[J], 2003, 67: 4223—4230
- [4] Ladeira A. C. Q., Ciminelli V. S. T., Duarte H. A., et al.. Geochim. Cosmochim. Acta[J], 2001, 65: 1211—1217
- [5] Darryl R. R., Robert G. F., Donald L. S.. J. Colloid Interface Sci.[J], 2003, 263: 346—376
- [6] Lee S., Anderson P. R.. J. Colloid Interface Sci.[J], 2005, 286: 82—89

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(308KB)

[HTML全文]

[\({article.html| WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

As(V); Zn(II); 电子结构; 密度泛函

本文作者相关文章

PubMed

- [7]Jing C. Y., Korfiatis G. P., Meng X.G.. Environ. Sci. Technol.[J], 2003, 37: 5050—5056
 [8]Jing C. Y., Meng X. G., Liu S. Q., et al.. J. Colloid Interface Sci.[J], 2005, 290: 14—21
 [9]Pena M., Yong J. C., Meng X.G., et al.. Environ. Sci. Technol.[J], 2006, 40: 1257—1262
 [10]Howard C. J., Sabine T. M., Dickson F. F. Acta Crystallographica B.[J], 1991, 47: 462—468
 [11]Trainor T. P., Brown Jr. G. E., Parks G. A.. J. Colloid Interface Sci.[J], 2000, 231: 359—372
 [12]Waychunas G. A., Fuller C.C., Davis J. A.. Geochim. Cosmochim. Acta[J], 2002, 66: 1119—1137
 [13]Waychunas G. A., Fuller C.C., Davis J. A., et al.. Geochim. Cosmochim. Acta[J], 2003, 67:1031—1043
 [14]Becker A. D.. J. Chem. Phys.[J], 1993, 98: 5648—5652
 [15]Lee C., Yang W., Parr R. G.. Phys. Rev. B[J], 1998, B37: 785—792
 [16]Hay P. J., Wadt W. R.. J. Chem. Phys.[J], 1985, 82: 270—283

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 3111