Fe (III)水合作用的从头算研究MDPI Liquids

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/39767.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

Fe (III)水合作用的从头算研究MDPI Liquids。论文标题：An Ab Initio Investigation of the Hydration of Iron(III)

论文链接：https://www.mdpi.com/2673-8015/6/1/8

期刊名：Liquids

期刊主页：https://www.mdpi.com/journal/liquids

Pye, C.C.; de Paola Rodrigues, F. An Ab Initio Investigation of the Hydration of Iron(III). Liquids 2026, 6, 8. https://doi.org/10.3390/liquids6010008

Fe(III)的水合结构与振动光谱对理解核电水化学、腐蚀产物迁移及酸性矿山废水环境至关重要。本文从头算研究，系统计算[Fe (H2O)n] ^{3} +（n=0 – 6、18）的能量、结构与振动频率，揭示第二层水合壳对精准再现Fe – O键长与拉伸频率的关键作用，为水溶液中Fe
(III)配位结构提供可靠量子化学模型。

研究采用HF、MP2及B3LYP方法，结合6 – 31G与6 – 31+G基组，系统优化从单水合到十八水合（含第一层6个水、第二层12个水）的Fe
(III)水合团簇结构。结果显示，随配位水分子数增加，Fe – O键长逐步增大，六水合[Fe (H2O)n] ^{3} +呈理想Th对称高自旋八面体构型，与晶体结构一致。

单层水合模型计算的Fe – O键长（2.032 – 2.054 Å）略长于实验值（1.98 – 2.01 Å），且对称拉伸频率（413 – 451 cm- ^{1} ）显著低于实验值（~510 cm- ^{1} ）。当引入显式第二层水合壳形成[Fe (H2O)18] ^{3} +后，Fe – O键长缩短约0.025 Å，与实验高度吻合；Fe – O对称拉伸频率提升至500 cm-1以上，精准匹配拉曼观测结果。

研究进一步解析不同水合数下的稳定构型：单水合为C2v对称，双水合以D2d为主，三水合为D3，四水合为S4，五水合为C2v，六水合为Th。十八水合模型中，T与S6对称构型能量最低，第二层水分子以氢键网络稳定第一层配位结构，是实现结构与光谱精准预测的核心。

该工作证实，仅考虑第一层水合不足以准确描述Fe (III)水合，显式第二层水合是还原真实溶液结构与振动特性的必要条件。研究建立的高精度量子化学方法，可为超临界水冷堆水化学模拟、金属离子溶剂化理论计算及腐蚀机理研究提供可靠理论基础与计算范式。

来源：Liquids

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发