

# 优秀论文简介

论文题目：LDHs类材料层间距影响因素的理论研究

学院：理学院 班级：应化1308

姓名：唐汉 学号：2013016468

指导教师：鄢红

## 一.课题背景与意义

层状双金属氢氧化物是一类具有独特结构的层状材料，简称为LDHs类材料，它由类水镁石结构的阳离子层板和层间可交换的阴离子以及层间的水分子组成。阳离子层板中三价阳离子对二价阳离子的替换使层板带上了正电荷，因此需要层间的阴离子来平衡电荷。利用LDHs类材料层间阴离子可交换的性质，目前该材料已经广泛应用于催化、新型功能材料的制备等领域，并且展现出了巨大的应用前景。

本课题所采用的理论研究方法是分子动力学模拟，分子动力学模拟运用牛顿力学原理和自建的力场模拟原子数较多的复杂的体系，适用于模拟原子尺度的体系短时间内的变化过程。该方法在模拟大分子复杂体系时往往能够取得能够接近实验真实值的非常良好的效果。

本课题运用分子动力学模拟方法模拟NiAl-LDHs材料100ps内的变化情况，NiAl-LDHs的Ni/Al值(R值)分别为1.6、2、2.6、3.5、5、8。计算的模型的层间阴离子包括氯离子、溴离子、硝酸根离子、硫酸根离子、碳酸根离子、甲酸根离子和苯磺酸根离子。通过比较分析模型模拟后的总势能、静电能、范德华力、结合能和层板间距的变化情况，探究对LDHs类材料层板间距产生影响最大的因素。

水滑石类化合物在催化、工业、医药等方面具有广阔和应用前景。对层间距的影响因素进行理论研究对于构筑新型功能材料具有重要的意义。

## 二.研究内容和过程

(1) LDHs模型的构建：分别建立Ni/Al值为1.6、2、2.6、3.5、5、8，层间阴离子为氯离子、溴离子、硝酸根离子、硫酸根离子、碳酸根离子、甲酸根离子和苯磺酸根离子的NiAl-LDH模型。

(2) 结果讨论并与实验数据比较：用分子动力学模拟的方法对建立的模型进行理论计算，将结果中的数据绘图比较，数据包括：层间距、总势能、静电能、范德华力和结合能。将以上数据的趋势图比较分析，探究它们的变化规律和对层间距的影响，得到最后结论。计算软件为Material Studio 6.0软件中的Discover模块。

### 三.主要结论

1.体系的总势能主要组成部分是静电能，静电力值远大于范德华力值，这说明主客体相互作用的主要方式是静电力。静电力是影响LDH层间距大小的主要因素。

2.LDHs材料中，通常层板间距在  $M(II)/M(III) < 3$  时较小。对于不同的层间阴离子，层间距最小值所对应的  $M(II)/M(III)$  值往往不同， $NO_3^-$ 、 $Cl^-$ 、 $CO_3^{2-}$  和  $SO_4^{2-}$  在  $R=2$  时层板间距最小， $Br^-$  和  $HCOO^-$  在  $R=2.6$  时层间距最小，当  $8 > R > 4$  时，层间距将趋于稳定，在该范围内不再随着  $R$  值的增大而变化。

3.含体积较大的层间阴离子的LDHs类材料通常层间距更大，说明LDHs材料需要更大的层间空间才能容纳大的层间阴离子。