

系列杂氮钛三环中的分子内弱相互作用的紫外光电子能谱和理论研究

孙政,郑世钧,孟令鹏,王殿勋

中国科学院化学研究所·北京(100080);中国科学院动态及稳态结构国家重点实验室·南京(210008);河北师范大学化学系·石家庄(050016)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 首次报道了四种杂氮钛三环的紫外光电子能谱,结合量子化学从头算和电子密度拓扑分析方法对这些化合物的电子结构和分子内存在的弱相互作用进行了分析研究。通过优化STO-6G(d)基组(C:1s=5.66,ζ2s=1.675,ζ2p=1.66;O:ζ1s=7.67,ζ2s=2.25,ζ2p=2.20;N:ζ1s=6.66,ζ2s=1.91,ζ2p=1.89;H:ζ1s=1.24)对所研究的化合物进行了分子轨道计算,

结合计算结果对化合物的紫外光电子能谱进行了解析和指认。实验得到的体现分子内弱相互作用σN-

Ti的轨道电子的电离能表明了N,Ti间相互作用的弱成键特性,电子密度拓扑分析显示N,Ti原子间存在体现成键作用的键鞍点,键鞍点处电子密度的拓扑性质也进一步支持了N,Ti间弱成键作用的特性。

关键词 [钛化合物](#) [氮杂环化合物](#) [相互作用](#) [紫外光电子谱法](#) [从头算法](#) [电子密度](#)

分类号 [064](#)

PES and theoretical studies on electronic structure and intramolecular interaction of some titanatranes

Sun Zheng,Zheng Shijun,Meng Lingpeng,Wang Dianxun

Inst of Chem, CAS.Beijing(100080);Nanjing Inst Geol & Palaeontol, Acad Sinica, NE Univ.Nanjing(210008);Hebei Teachers Univ, Dept Chem. Shijiazhuang(050016)

Abstract In this study, photoelectron spectra(PES) of four titanatranes are recorded for the first time. The molecular geometries of the compounds have been optimized at RHF/3-21G, and the results show that all the compounds have Cs symmetry. To assign the PES of the compounds, the ab initio calculation at RHF with modified STO-6G(d) basis sets has also been performed. The assignment of the PES shows that the PES band of dominant σN-Ti bond character in these compounds in above 9.1 eV. The electron density topological analysis of the compounds shows that there is a bond critical point between Ti and N of each compound, which suggests the existence of a Ti-N bond in these compounds. Both PES and theoretical studies show that the intramolecular interaction of N and Ti in the titanatranes is a kind of weak bonding interaction.

Key words [TITANIUM COMPOUNDS](#) [NITROGEN HETEROCYCLICS](#) [INTERACTIONS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [ELECTRON DENSITY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(OKB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“钛化合物”的](#)

[相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [孙政](#)
- [郑世钧](#)
- [孟令鹏](#)
- [王殿勋](#)