

PAN和PPN的HeI光电子能谱 (PES)

李益民,李海洋,孙巧,王殿勋

中国科学院安徽光学精密机械研究所;中国科学院化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 给出了两个重要的大气污染化合物PAN和PPN的紫外光电子能谱 (PES)。为了 指认PES谱,对两个分子实施了HF和OVGF方法的理论计算,并给出了它们各自的优化几何构型、PES谱低电离能区的两个分离 (PAN) 为11.42 eV和12.07 eV; PPN为 11.08 eV和11.79 eV) 被归于分子中主要体现 “NO₂”基团贡献的最高占有分子轨道 (HOMO) 和次最高占有分子轨道 (SHOMO) 电子电离作用结果。而PPN的第一电离 能11.08 eV低于PAN的11.42 eV, 是由于PPN分子中增加的 “CH₂”基团电子的给予 作用, 这为PPN应具有较大的生物毒性提供合理的解释。

关键词 [从头计算法](#) [聚丙烯腈](#) [PPN](#) [毒性](#) [电离能](#)

分类号 [0641](#)

Photoelectron Spectroscopic (PE) Spectra of PAN and PPN Molecules

Li Yimin, Li Haiyang, Sun Qiao, Wang Dianxun

Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences; Graduate School of Chinese Academy of Sciences

Abstract The photoelectron spectroscopic spectra (PES) of two important atmospheric pollutants, peroxyacetyl nitrate (PAN) and peroxypropionyl nitrate (PPN), are reported. To assign the PES of the molecules both HF and OVGF (outer valence green function) methods have been performed. Moreover, the molecular geometries of the two compounds have been optimized. There are two separate peaks in the low energy region of PES (11.42 eV and 12.07 eV for PAN, 11.08 eV and 11.79 eV for PPN) resulted from respective ionizations of the electrons of the HOMO and the SHOMO, which have dominant contributions of the NO₂ group in the molecules. The first ionization energy (11.08 eV) of PPN is lower than that (11.42 eV) of PAN, which shows that PPN possesses more potent bioactivity than PAN, which is attributed to the electron donating action of the increasing "CH₂" group.

Key words [AB INITIO CALCULATION](#) [PAN](#) [PPN](#) [TOXICITY](#) [IONIZATION ENERGY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“从头计算法”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [李益民](#)
- [李海洋](#)
- [孙巧](#)
- [王殿勋](#)