

环芳类化合物分子轨道相互作用的研究

刘韩星

武汉工业大学新材料研究所, 武汉 430070

摘要:

建立模型分子描述环芳类分子中二苯环、二乙炔的 $\pi$ 轨道间的相互作用, 应用多重散射X $\alpha$ 自洽场方法对模型分子的电子结构进行计算, 得到分子轨道通过空间相互作用的大小随二苯环、二乙炔间距离的增加呈指数下降. 在环芳类化合物分子电子结构研究基础上, 分析了分子轨道通过键的相互作用道通过空间相互作用与通过键相互作用相互抵消. 采用过渡态方法计算环芳类化合物前线分子轨道电离能, 与实验符合较好

关键词: 环苯类化合物 分子轨道相互作用 光电子能谱 多重散射X $\alpha$ 自洽场方法

收稿日期 1994-12-17 修回日期 1995-03-11 网络版发布日期 1995-10-15

通讯作者: 刘韩星 Email:

本刊中的类似文章

1. 陆尔东, 季明荣, 麻茂生, 刘先明, 徐彭寿. 多晶Fe<sub>60</sub>Ni<sub>40</sub>合金阳极钝化膜的XPS研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 1031-1035
2. 卢炯平. 固体薄膜的超高真空化学气相沉积[J]. 物理化学学报, 1995, 11(12): 1114-1119
3. 董栋, 张生, 朱涛, 甘良兵, 刘忠范. 一种新型C<sub>60</sub>-硫醚衍生物分子在金表面上的自组装[J]. 物理化学学报, 2001, 17(11): 978-981
4. 胡云玩, 钱惠琴, 陈桥, 毛宏颖, 宋飞, 黄寒, 李海洋, 何丕模, 鲍世宁. Fluorescein有机薄膜在Ag(110)面上的生长研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 470-474
5. 赵良仲, 刘芬, 张琳. LnCu<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (Ln=Gd, Nd) 电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(04): 310-313
6. 赵良仲, 刘芬, 李建章, 徐永东. 三维编织C/SiC纤维复合块材的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(09): 802-805
7. 冯绍彬, 高士波, 包伟, 冯丽婷, 张经纬, 李宗忠. 电活化现象与金属电沉积初始过程的研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(05): 463-467
8. 王殿勋, 李颖, 李胜, 陈本明. 同位素氧-18分子的He I紫外光电子能谱[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 771-773
9. 杨达林, 丁传凡, 周游, 蔡晖, 朱起鹤, OCS的多光子电离高分辨光电子能谱[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 838-840
10. 赵良仲, Bi-Sr-Ca-Cu-O超导体与氧化物衬底材料的反应性估计[J]. 物理化学学报, 1994, 10(05): 409-412
11. 王殿勋, 郑世钧, 孟令鹏, 蔡新华, 戴萃辰, 徐广智, J. B. Peel. 唑吩多烯基丙二酸二甲酯类化合物的气相研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 179-182
12. 邓俊琢, 王弘立. Fe(110)面上CO化学吸附状态的吸附历史依赖关系[J]. 物理化学学报, 1993, 9(05): 589-593
13. 孙政, 郑世钧, 孟令鹏, 乔春华, 王殿勋. 几种硫醚化合物的紫外光电子能谱及量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 78-83
14. 王海芳, 邓小勇, 王竞, 高兴发, 邢更妹, 施真进, 顾镇南, 刘元方, 赵宇亮. XPS研究单壁碳纳米管(SWNTs)上碳与碘形成的共价键[J]. 物理化学学报, 2004, 20(07): 673-675
15. 陈明安, 张新明, 谢玄, PP/PP-g-MAH与铝板粘接界面相的XPS研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 882-886
16. 张寒洁, 鲍世宁, 何丕模, 王穗东, 冯明凯, 李振声, 李述汤. 有或没有Alq<sub>3</sub>参与情况下LiF和Al的化学反应[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 770-773
17. 黄寒, 严欣微, 毛宏颖, 陈桥, 钱惠琴, 张建华, 李海洋, 何丕模, 鲍世宁. 银(110)表面北有序薄膜电子态的研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 892-896
18. 赵立艳, 王学伟, 郭玉国, 吴念祖, 谢有畅. 亚甲基蓝在云母表面吸附状态的研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(10): 896-901
19. 钱丽萍, 邓文礼. 正十八烷醇在HOPG上形成自组装膜的吸附特性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 443-447
20. 李志伟, 李香芝, 许先芳, 赵春元, 陈六平. NaP<sub>4</sub>及其正负离子的结构和光谱性质[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 670-674
21. 马莹, 陈敏, 宋萃, 郑小明, 甲苯、丙酮和乙酸乙酯在新型铂-钯/不锈钢丝网催化剂上的催化氧化[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1132-1136
22. 陈瑞芝, 郑世钧, 蔡新华, 孟令鹏, 王殿勋. 苯氧基衍生物气相HeI紫外光电子能谱研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(05): 433-437
23. 裴克梅, 李益民, 阙瑞峰, 罗晓琳, 李海洋. 气相硝酸及过氧亚硝酸的结构和光电子能谱[J]. 物理化学学报, 2003, 19(01): 55-59
24. 古风才, 赵竹益, 李英慧, 门娟, 严菊明, 刘瑞贤, 张丽华. 表面修饰二氧化锡纳米微晶的制备与表征[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 621-625
25. 任海兰, 刘韩星, 张汉林, 戚阳世俞, 王典芬. Cr, Fe, Cu/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>界面化学结构的光电子能谱[J]. 物理化学学报, 1996, 12(10): 900-904
26. 张建华, 吴悦, 庄友谊, 张寒洁, 李海洋, 何丕模, 鲍世宁, 刘凤琴, 李热西, 易卜拉欣, 钱海杰. C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>在Ru(1010)表面上的分子轨道对称性[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 600-603
27. 施申蕾, 楼辉, 张建华, 吕萍, 江宁, 何丕模, 鲍世宁. COT-H在金属Ru表面上沉积的光电子能谱分析[J]. 物理化学学报, 2002, 18(01): 30-33
28. 章俞之, 快素兰, 黄银松, 王思春, 胡行方. MoO<sub>3</sub>电致变色薄膜的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(01): 79-82
29. 曹晓燕, 吴伟, 王东, 葛茂发, 王殿勋. 1, 2, 5-噁二噻衍生物电子结构的紫外光电子能谱研究[J]. 物理化学学报, 2000, 16(06): 491-495
30. 程伟, 张维炎, 王日杰, 王亚权, 何菲, 周俐. 加氢脱硫催化剂各组分的相互作用与催化性能[J]. 物理化学学报, 1999, 15(07): 647-651
31. 仲崇民, 王德峥, Takashi Ushikubo, Keisuke Wada. 甲醇、水及乙烯在氧化铈薄膜上吸附行为研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 219-225
32. 赵良仲, 王瑞兰, 徐洪雨, 李宏成, 刘世志. Gd-Ba-Cu-O超导膜的XPS研究[J]. 物理化学学报, 1999, 15(05): 398-402
33. 毕慧敏, 车会娟, 郑世钧, 孟令鹏, 王殿勋. 真空下X<sub>2</sub> (X=Cl, Br)与AgOCN气-固反应机理[J]. 物理化学学报, 2003, 19(03): 272-274
34. 邱丽美, 刘芬, 赵良仲. K-Pb-Tl-O复合氧化物的合成和电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(07): 633-635
35. 李胜, 李颖, 王晓慧, 丁传凡, 陈文武, 高毅勤, 王殿勋. B(OCH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>电子结构的HeI紫外光电子能谱研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(07): 641-643
36. 杨达林, 凌云, 丁传凡, 周游, 朱起鹤. 碘甲烷通过A态和C态的多光子电离[J]. 物理化学学报, 1993, 9(04): 442-446
37. 赵良仲. 碱土金属氧化物和过氧化物的O<sub>1s</sub>电子结合能测定[J]. 物理化学学报, 1993, 9(02): 170-174