

噻吩多烯基噻吩酮系列化合物的气相紫外光电子能谱研究

王殿勋,郑世钧,孟令鹏,徐广智,PELL, J. B.

中国科学院化学研究所;澳大利亚拉卓布大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文提供了噻吩多烯基噻吩酮系列化合物的气相HeI光电子能谱(UPS),并进行了每个研究分子的MNDO量子化学计算。表明乙烯基基团的数目与其分子的HOMO实验电离能(L~p)呈线性递降关系。MNDO计算结果不但很好地指认了每个研究分子UPS谱的归属,而且从分子轨道特性上提供了该类化合物分子为三岔共轭体系的理论基础。

关键词 [共轭](#) [量子化学](#) [光电子谱法](#) [噻吩 P](#) [MNDO](#) [噻吩酮](#)

分类号 [0641](#)

UPS studies of the thienyl polyenic thienyl ketones series compounds

WANG DIANXUN,ZHENG SHIJUN,MENG LINGPENG,XU GUANGZHI,PELL, J. B.

Abstract HeI spectra of some thienyl polyenic thienyl ketones I (m, n = 0, 0; 1, 0; 2, 0; 1, 1) are reported. The assignment of the spectra have also been done using the optimized MNDO MO calculation on each studied mol. The linear reduction of HOMO potential energy (Ip) which is mainly antibonding character of ethylenic group with the increment of ethylenic group no. is the base of homologous linear rule of this series compounds The lack of conjugative bond in whole mol. system could be considered as separation of carbonyl group.

Key words [CONJUGATION](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [PHOTOELECTRON SPECTROSCOPY](#) [THIOPHENE P](#) [THIENONE](#)

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“共轭”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王殿勋](#)
- [郑世钧](#)
- [孟令鹏](#)
- [徐广智](#)
- [PELL](#)
- [JB](#)