

邻硝基乙酰苯胺衍生物的XPS振起伴峰及其价带谱的研究

王殿勋, 笪有仙, 王立本, 徐广智, 唐有祺

中国科学院化学研究所; 北京大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 研究了一组邻硝基乙酰苯胺衍生物的X射线光电子能谱(XPS). 观察到硝基的N1s光电子谱有明显分裂, 可认为是N1s振起伴峰的反映, 而且苯环上的取代基对该振起伴峰强度有影响, 按照Pignataro等关于振起伴峰与主峰的能量分离以及分子内电荷转移有关的观点, 计算了振起伴峰与主峰的面积比. 结果表明, 峰间距与面积比的趋势一致.

因此二者都可作为分子内电荷转移的粗略估计.

关键词 [硝基化合物](#) [X射线光电子谱法](#) [能带结构](#) [电荷转移](#) [价带](#) [乙醛酰胺](#)

分类号 [0621.16](#) [0657](#)

Studies on XPS shake-up and valence band spectra of o-nitro acetanilide derivatives

WANG DIANXUN, DA YOUXIAN, WANG LIBEN, XU GUANGZHI, TANG YOUQI

Abstract The studies on X-ray photoelectron spectroscopic shakeup and valence band spectra of o-nitroacetanilide derivatives I (R = H, 2-Me, 3-Me, 4-cyano, 4-MeO, 3-Cl, 3-Br, 4-Br) have been reported. The results show that the splitting of N 1s photoelectron peaks of the nitro group may be related to the intramol. charge-transfer effect between donor and acceptor within the same mol., and the magnitude of intramol. charge-transfer can be estimated by the distance of splitting of N 1s of nitro group or by the relative area ratio of the splitting peaks.

Key words [NITRO COMPOUNDS](#) [X-RAY PHOTOELECTRON SPECTROMETRY](#) [BAND STRUCTURES](#) [CHARGE TRANSFER](#) [VALENCE BANDS](#) [ACETANILIDE](#)

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“硝基化合物”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王殿勋](#)
- [笪有仙](#)
- [王立本](#)
- [徐广智](#)
- [唐有祺](#)