

苯并噻唑衍生物的气相HeI紫外光电子能谱(UPS)及量子化学研究

李晓艳,孟令鹏,郑世钧,王殿勋

河北师范大学化学学院,石家庄(050091);中国科学院化学研究所.北京 (100080)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 对苯并噻唑系列衍生物的气相HeI紫外光电子能谱(UPS)进行了研究. 首次报道了五种化合物的紫外光电子能谱, 利用Gaussian94从头算的量子化学计算方法对其进行了计算, 并结合计算结果对各个分子体系的谱图进行了指认. 研究表明: 分子的电离能受取代基性质的影响, 取代基的给电子能力越大, 体系的共轭效应越强, 电离能就越低. 对苯并噻唑衍生物而言, 6-位取代基对电离能的影响大于2-位取代基的影响.

关键词 [苯并噻唑](#) [紫外光电子能谱](#) [从头计算法](#) [电离能](#) [共轭](#)

分类号 [0621](#) [0641](#)

Studies on Derivatives of Benzothiazole by HeI Photoelectron Spectroscopy

Li Xiaoyan, Meng Lingpeng, Zheng Shijun, Wang Dianxun

College of Chemistry, Hebei Normal University, Shijiazhuang(050091)

Abstract

Key words [BENZOTHIAZOLE](#) [UPS](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [IONIZATION ENERGY](#) [CONJUGATION](#)

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“苯并噻唑”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

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