

研究论文

系列二亚胺Os(II)配合物[Os(L)₂(CN)₂(phen)] (L=PH₃, DMSO; phen=1,10-邻二氮杂菲)及[Os(PH₃)₂(phen)Br₂]电子结构和光谱性质的理论研究

吴玉辉 周欣 张红星*

(吉林大学理论化学研究所理论化学计算国家重点实验室 长春 130023)

收稿日期 2008-6-20 修回日期 2008-8-15 网络版发布日期 2009-2-24 接受日期 2008-10-26

摘要

采用自旋限制和非限制B3LYP/UB3LYP方法分别优化了系列Os(II)二亚胺配合物[Os(L)₂(CN)₂(phen)] [phen=1,10-邻二氮杂菲; L=Ph₃ (1), 二甲基亚砷(DMSO) (2)]及[Os(PH₃)₂(phen)Br₂] (3)的基态和激发态几何构型. 通过TD-DFT方法结合PCM溶剂化模型计算了配合物1~3在二氯甲烷溶液中的吸收和发射光谱并指认了相应的跃迁性质. 通过理论化学计算, 揭示了π酸配体及π碱配体对配合物磷光发射性质的影响及原因. 并进一步解释了配合物3易于在Os—Br键处断裂而发生反应的量子化学机理. 对配合物在不同溶剂中的磷光发射性质的计算表明, 溶剂对配合物的量子产率存在着影响并且配合物具有溶剂化显色效应.

关键词

[Os\(II\)配合物](#) [激发态](#) [密度泛函理论](#) [TD-DFT](#) [溶剂化效应](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

张红星 zhanghx@mail.jlu.edu.cn

作者个人主页:

吴玉辉 周欣 张红星*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (695KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[Os\(II\)配合物” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [吴玉辉,周欣,张红星](#)