化学学报 2007 65 (8): 673—677 ISSN: 0567-7351 CN: 31-1320/06

研究论文

芴-硫芴共聚物的电子结构和光谱性质的理论研究

刘彬[1], 封继康*,[1,2], 任爱民[1], 杨丽[1], 邹陆一[1]

([1]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)
([2]吉林大学化学学院 长春 130023)

收稿日期 2006-6-29 修回日期 2006-9-23 网络版发布日期 2007-4-13 接受日期 2006-12-2

摘要 用DFT-B3LYP方法对低聚物$(PF30T)_n$ [*n*(芴)∶ *n*(硫芴)=2∶ 1, 物质的量之比, *n*=1～4], $(PF50T)_n$ [*n*(芴)∶ *n*(硫芴)=1∶ 1, 物质的量之比, *n*=1～4]体系全优化, 得到两系列低聚物的电离能($IP_{(a,v)}$)、电子亲和势($EA_{(a,v)}$)、空穴抽取能(HEP)、电子抽取能(EEP). 在此基础上用ZINDO和TD-DFT方法计算吸收光谱, 分析了两个系列的HOMO-LUMO能隙随着*n*递增的变化趋势及硫芴含量对低聚物电子结构和光谱性质的影响, 推断了高聚物的电子和光谱性质. 用*ab initio* CIS方法优化了低聚物的S_1激发态结构并分析了其与发射光谱的关系. 研究显示: 2,8位引入的硫芴基团, 破坏了链的共轭, 而且随着硫芴含量的增加, HOMO-LUMO能隙变大, 光谱蓝移; 激发态结构趋于共面化.

关键词 聚合物 密度泛函理论(DFT) 光谱性质

分类号

Theoretical Investigation on Electronic Structure and Optical Proper-ties of Polyfluorene by Copolymerization with Dibenzothiophene

LIU Bin[1], FENG Ji-Kang*,[1,2], REN Ai-Min[1], YANG Li[1], ZOU Lu-Yi[1]

([1] *State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chem-istry, Jilin University, Changchun 130023*)
([2] *College of Chemistry, Jilin University, Changchun 130023*)

Abstract We have full optimized the structures of the oligomers of $(PF30T)_n$ [*n*(fluorene)∶ *n*(dibenzothiophene)=2∶ 1, *n*=1～4] and $(PF50T)_n$ [*n*(fluorene)∶ *n*(dibenzothiophene)=1∶ 1, *n*=1～4] with DFT/B3LYP method, and calculated the $IP_{(a,v)}$, $EA_{(a,v)}$, HEP and EEP. Using TD-DFT and ZINDO methods on the structures of the optimized oligomers, we analyzed the trend of the variation of HOMO-LUMO gaps with 1/*n* and the influence on the spectral properties with the increasing of dibenzothiophene, and extrapolated the electronic structure and optical properties of the polymers. We optimized the S_1 excited ge-ometries with *ab initio* CIS and studied the relation of S_1 state and emission spectra. It shows that all atoms come to coplanar in S_1 state. The results show that, with introducing dibenzothiophene at the 2,8 positions of fluorene, the conjugation is broken, the HOMO-LUMO gaps are broader, and the spectrum is blue-shifted.

Key words polymer density functional theory optical property

DOI:

通讯作者 封继康 jikangf@yahoo.com

扩展功能
本文信息
Supporting info
PDF(283KB)
[HTML全文](58KB)
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“聚合物”的相关文章
本文作者相关文章
· 刘彬
· 封继康
·
·
· 任爱民
· 杨丽
· 邹陆一