

论文

配合物[N,N'-二(亚水杨基)-1,2-乙二胺]Pt(II)光谱性质的理论研究

周欣¹, 孟烜宇¹, 李明霞², 潘清江², 张红星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. 黑龙江大学化学化工与材料学院, 哈尔滨 150080

摘要:

化合物[N,N'-二(亚水杨基)-1,2-乙二胺]Pt(II)(1)在OLED材料上具有很大的应用潜力, 我们利用密度泛函(DFT/LanI2dz)方法计算了它的电子结构和光谱性质. 计算结果与实验值符合得很好. 计算结果表明, 该化合物最低能吸收和三态磷光发射均来自于[L(Phenoxide lone pair)→ π^* (imine)](LLCT: ligand-to-ligand charge transfer)和[Pt(5d)→ π^* (Schiff base)](MLCT: metal-to-ligand charge transfer)的混合电荷跃迁. 另外, 计算得到了该配合物在气态中的激发态几何结构. 通过在不同的溶液中计算吸收和发射光谱, 发现该化合物没有明显的溶剂化显色效应, 说明溶液极性对光谱的影响不大.

关键词: 发光Pt(II)配合物 电荷转移 激发态 从头算 密度泛函理论

Theoretical Studies on the Spectroscopic Properties of N,N'-Bis(salicylidene)-1,2-ethylenediaminePt(II) Complexes

ZHOU Xin¹, MENG Xuan-Yu¹, LI Ming-Xia², PAN Qing-Jiang², ZHANG Hong-Xing^{1*}

1. State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, China;
2. School of Chemistry and Material Science, Heilongjiang University, Haerbin 150080, China

Abstract:

The electronic structures and spectroscopic properties of N,N'-bis(salicylidene)-1,2-ethylene-diamine (H2salen)Pt(II) complexes were calculated with the DFT/LanI2dz method owing to its potential application on the OLEDs. The calculation results were comparable with the experimental ones and can be used to predict some experimental phenomena. The calculation reveals that both the lowest-energy absorption and triplet phosphorescence arise from the mixed transitions of [L(Phenoxide lone pair)→ π^* (imine)](LLCT) and [Pt(5d)→ π^* (Schiff base)](MLCT). Furthermore, our calculations determined the triplet-excited geometrical structure for the complex, providing a straightforward view for experiment. No obvious solvatochromic effect was observed in the absorption and emission spectra in our calculation, indicating that the spectra wave-lengths are independent of the solvent polarity.

Keywords: Luminescent Pt(II) complex Charge transfer Excited state *Ab initio* calculations Density functional theory(DFT)

收稿日期 2007-02-09 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(367KB)

[HTML全文](OKB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 发光Pt(II)配合物

▶ 电荷转移

▶ 激发态

▶ 从头算

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 周欣

▶ 孟烜宇

▶ 李明霞

▶ 潘清江

▶ 张红星

▶ 周欣

▶ 孟烜宇

▶ 李明霞

▶ 潘清江

▶ 张红星

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

参考文献:

1. Leung A. C. W., Chong J. H., Patrick B. O., *et al.* Macromolecules[J], 2003, 36: 5051—5054
2. Lavastre O., Illitchev I., Jegou G., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 2002, 124: 5278—5279
3. Wang P., Hong Z., Xie Z., *et al.* Chem. Commun.[J], 2003: 1664—1666
4. Che C. M., Chan S. C., Xiang H. F., *et al.* Chem. Commun.[J], 2004: 1484—1485
5. Becke A. D.. Phys. Rev. A[J], 1988, 38: 3098—3100
6. Lee C., Wang W., Parr R. G.. Phys. Rev. B[J], 1988, 37: 785—789
7. Foresman J. B., Head Gordon M., Pople J. A., *et al.* J. Phys. Chem.[J], 1992, 96: 135—149
8. Casida M. E., Jamorski C., Casida K. C., *et al.* J. Chem. Phys.[J], 1998, 108: 4439—4449
9. Cossi M., Scalmani G., Regar N., *et al.* J. Chem. Phys.[J], 2002, 117: 43—54
10. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., *et al.* Gaussian 03, Revision A.1[CP], Pittsburgh PA: Gaussian Inc., 1998
11. ZHOU Xin(周欣), PAN Qing-Jiang(潘清江), LI Ming-Xia(李明霞), *et al.* Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2007, 28(5): 903—906

本刊中的类似文章

1. 魏子章,李步通,潘清江,张红星.乙基溴及其阳离子的低能激发态从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1903-1906
2. 张玉华,夏宝辉,张红星.氮化铱配合物离子[OsN(mnt)₂]⁻的电子结构和光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 764-767
3. 朱元强,郭勇,谢代前.2-(2-甲基烯丙基)-3-(3-甲基-1,2-丁二烯基)环己-2-烯酮重排生成八元环化合物反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 385-388
4. 申勇立,曹映玉,杨恩翠,郝金库.异戊烯与甲醇成醚反应机理的量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1535-1539
5. 王鹏,王大喜,高金森,董坤,徐春明,刘靖疆.三氯化铝烷基氯化咪唑盐结构和红外光谱的模拟计算[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1505-1508
6. 吴莹,李正,鞠金梅,闻荻江.FcBAK/钼磷酸电荷转移型杂化分子的合成及性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(4): 779-782
7. 孙晓颖,王钦,李志儒,吴迪,孙家锺,唐敖庆.He₂F⁻体系的分子间相互作用势能面[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 960-963
8. 陈建成,邢小鹏,唐紫超,高振.二元合金团簇CoGe_n⁻(n=1~12)的结构和稳定性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 535-538
9. 温斌;魏娜然;马红军;赵纪军;李廷举.新金刚石稳定性及晶体结构模型的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1332-1335
10. 金莲姬,张珉,苏忠民,史丽丽,赵亮.单壁碳纳米管内包含有机小分子(乙炔、乙烯和乙烷)结构的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 755-759
11. 周欣,潘清江,李明霞,张红星,唐敖庆.三联吡啶Pt(II)配合物的基态和激发态的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 900-903
12. 曲雯雯,谭宏伟,刘若庄,陈光巨.侧链间氢键的协同效应对环状多肽自组装的影响[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 307-311
13. 赵丽娇,钟儒刚,戴乾圜.β-甲基亚硝基哌嗪致癌剂第二亲电中心邻基参与作用的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2386-2389
14. 石绍庆,杨国春,窦卓,苏忠民.[M₆O_m(C₂₅N₄H₁₈)_n]²⁻(M=W, Mo; n=1, 2; m=17,18)的二阶非线性光学性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2398-2401
15. 潘清江,周欣,张红星,付宏刚.Au(I)电荷转移配合物光谱性质的从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 330-333
16. 李吉来,杭焯超,耿彩云,黄旭日,李方实,孙家锺.磺酰胺类化合物除草活性的QSAR研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 539-542
17. 李子亨,周向东,王德军,邹旭,王英楠,邹广田.卟啉/TiO₂界面的相互作用研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1151-1154
18. 徐定国,鄢国森.L1 β-Lactamase催化反应机理研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2453-2456
19. 苏钎,朱东霞,仇永清,陈徽,王悦.含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的Zn(II)配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1361-1364
20. 苏钎,朱东霞,仇永清,陈徽,王悦.含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的Zn(II)配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1361-1364
21. 李岩,封继康,任爱民,杨丽.芴与苯并硒二唑共聚物的电子结构和光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1561-1565
22. 申勇立,郝金库,曹映玉,杨鞞?SUP>.白藜芦醇清理羟基自由基夺氢机理的量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1743-1746

23. 丁燕怀,张平,姜勇,尹久仁,卢其斌,高德淑. F复合掺杂改进LiNi_{1/3}Co_{1/3}Mn_{1/3}O₂正极材料的电化学性能[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1839-1841
24. 魏子章,李步通,潘清江,张红星. FONO₂低能激发态和光电子谱的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 611-614
25. 熊杰明,龚良发,李前树. 杂硼原子簇B₆X⁻(X=N, P, As, Sb, Bi)稳定性和芳香性研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1968-1971
26. 李步通,魏子章,潘清江,张红星,孙家锺. 乙基硫自由基及阴、阳离子低电子激发态从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1972-1974
27. 杨静,张绍文,李前树. CH_nF_{4-n}与O₃吸氢反应途径和速率常数计算[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1975-1977
28. 魏子章,李步通,潘清江,张红星. OCIO里德堡态激发能的准确预测及其阴离子低能激发态的从头算研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2183-2186
29. 李明霞,周欣,潘清江,张红星,付宏刚,孙家锺. 联吡啶钌配合物[Ru(Htcterpy)X₃]³⁺[X=NCS,CN,Cl]的电子结构和光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2377-2380
30. 周子彦,赵继阳,刘敏,苏忠民,谢玉忠,吴学. 6-甲基-4-羟基嘧啶单体及二聚体激发态质子转移异构化反应及光谱的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2385-2389
31. 赵晓辉,梁俊,马菲,苏文杰,王鹏,付立民,艾希成,张建平. HL-LH2中色素分子间的单重激发态能量传递[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 149-153
32. 王嵩,于健康,丁大军,孙家锺. NO+HCCCO反应势能面的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 170-173
33. 王继芬,封继康. 二苄及其衍生物的结构优化、前线轨道及其性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 177-181
34. 艾纯芝,孙仁安,王长生,马琳,杨凌. 己烷催化异构化反应中氢溢流机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 182-186
35. 张运陶,李莉. 非金属氢化物pK_a定量结构性质关系(QSPR)研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 374-379
36. 王岩,方德彩,刘若庄. Lewis碱稳定的硼代苯与亲二烯体的Diels-Alder反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 1005-1010
37. 常青,吴水星,阚玉和,杨双阳,滕云雷,杨国春,苏忠民. 硅杂环戊二烯衍生物电子结构与光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 1011-1015
38. 纪艺琼,王墨焱,王兰芬,包鹏,刘扬. 稳定直线型硝酸-O₂⁻加合物的构型因素解析[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1801-1803
39. 陈健,谭凯,林梦海,张乾二. 过渡金属氧化物(M₂O₅)⁺_{m=1,2}(M=V, Nb, Ta)与C₂H₄气相反应机理的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1821-1825
40. 刘晓东,于艳波,仇永清,孙世玲,陈徽,苏忠民,王荣顺. 十二顶点邻位双取代碳硼烷衍生物二阶NLO性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1816-1820
41. 范建训,任爱民,封继康,薄冬生. 7-氮杂咪唑衍生物分子基态和激发态性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1091-1095
42. 王一,王永,韩克利. 非血红素配合物[FeIV(O)(TMC)(NCMe)]₂⁺与[FeIV(O)(TMCS)]⁺的几何结构、电子结构、成键性和反应活性比较[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2469-2473
43. 彭亮,丁万见,于建国,刘若庄. 硫代乙酰胺光化学反应机理的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2462-2468
44. 武光军,王鑫,于爱敏,王贵昌,杨雅莉,章福祥,关乃佳. 含氮ZSM-5分子筛骨架中氮取代位置的密度泛函计算[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2403-2406
45. 魏子章,王贵昌,卜显和. 联吡啶Ir(III)配合物电子结构及光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2393-2397
46. 蒋帆,吴云东. 最短α-螺旋的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2371-2376
47. 张成华,薛英,郭勇,鄢国森. N,N-二(对氟苄基)-N'-(2',3'-二脱氧-3'-硫代胞苷)甲脒水解反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2354-2359
48. 任杰,王炳武,陈志达,徐光宪. 密度泛函理论在分子磁学中的应用——混合价三核锰配合物磁性的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2331-2336
49. 徐文国,白王军,卢士香. SeH_n/SeH_n⁻(n=1~5)的结构、热化学及电子亲合能研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2281-2288
50. 苏钊,朱东霞,仇永清,陈徽,王悦. 含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的Zn(II)配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1361-1364
51. 刘莉,朱荣秀,张冬菊,刘成卜. 甲醇协助丙交酯开环聚合反应的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2420-2424
52. 苏钊,朱东霞,仇永清,陈徽,王悦. 含水杨醛缩苯胺双Schiff碱和吡啶配体的Zn(II)配合物的电子结构和二阶非线性光学性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1361-1364
53. 覃昊,李欣,孟祥丽,强亮生. O₃分子在CuO(110)面吸附的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 164-169
54. 阚玉和,李强. C₆₂及其吡啶衍生物结构与电子光谱的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 174-177
55. 蒋洁,孟素慈,马晶. 二聚(2,5-噻吩乙烯撑)基态和激发态的电子结构: 桥基和芳环取代的影响[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 370-376

56. 马海霞, 严彪, 宋纪蓉, 吕兴强, 王连江. DNAZ 酰基衍生物的分子结构及量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 377-381
57. 杨玉环, 潘纲, 马晓楠, 陈灏, 张美一, 何广智, 李薇. Zn(II) 在 TiO₂ 表面上的微观吸附模式研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 387-390
58. 薛严冰, 唐祯安. CO 在 SnO₂ (110) 面吸附特性的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 583-587
59. 林宪杰, 徐为人, 王建武, 刘成卜. 对甲氧基苯甲醛脲晶体结构、红外光谱及分子间相互作用的实验与理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(5): 897-900

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-	reviewuine	edfwen@163.com	edwena	Buy discount ugg cheap ugg shoes ugg ugg rainier b ugg usa discour boots ugg 5825 shoes sale ugg su