

论文

8-羟基喹啉锰配合物电子结构和光谱性质的含时密度泛函研究

夏树伟, 沙鹏艳, 于良民, 范玉华, 毕彩丰, 杨立荣

中国海洋大学海洋化学理论与工程技术教育部重点实验室, 青岛 266100

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)B3LYP方法, 对8-羟基喹啉锰配合物进行结构优化, 探讨了配合物的结构、分子轨道能级和组成、电荷分布和转移等; 采用含时密度泛函理论(TDDFT)B3LYP/6-31G(*d,p*)方法对配合物的电子结构进行计算, 获得其吸收光谱. 结果表明, Mn(III)与8-羟基喹啉中的N原子和O原子形成不对称六配位的稳定配合物, 金属锰对前线轨道的贡献很大, 在HOMO轨道中占28.53%, 在LUMO轨道中占68.30%; 中心金属锰(III)强烈地参与发光, 电子在基态与激发态之间的跃迁, 主要是中心金属锰及8-羟基喹啉配体间的电荷转移, 在可见光区存在2个强度较大的吸收峰, 分别位于756.8 nm和532.7 nm处. 通过对双分子体系的研究发现, 相邻2个分子之间能够进行微量电荷的转移, 分子间的相互作用对前线轨道组成有明显的影

关键词: 8-羟基喹啉锰配合物 吸收光谱 含时密度泛函

TD-DFT Study on Electronic Structure and Spectrum Properties of 8-Hydroxyquinolinato Manganese Complex

XIA Shu-Wei*, SHA Peng-Yan, YU Liang-Min, FAN Yu-Hua, BI Cai-Feng, YANG Li-Rong

Key Laboratory of Marine Chemistry Theory and Technology, Ministry of Education, Ocean University of China, Qingdao 266100, China

Abstract:

The structure and electronic properties of 8-hydroxyquinolinato manganese(III) complex(MnQ_3 , Q=8-hydroxyquinolinato) were studied theoretically with density functional theory(DFT). The structure was optimized and the calculation results show that the manganese ion is coordinated with one nitrogen atom and one oxygen atom of 8-hydroxyquinolinato ligand. The average bond length of Mn—N is 0.2072 nm and that of Mn—O is 0.1887 nm, which were consistent with the crystallographic data. In addition, the molecular structure and electronic structural characteristics of the complex were analyzed. The contribution of Mn(III) to the frontier molecular orbitals are significant, 28.53% to HOMO and 68.30% to LUMO. The electro-absorption spectrum of MnQ_3 was calculated by time-dependent density functional theory, the calculated results show that the two strong absorption peaks are at 756.8 nm and 532.7 nm respectively due to the charge transformation from intra-ligand to manganese(III). From two-molecule system, the charge was transported from one complex to the neighbor one. The intermolecular interaction affects the composition of the frontier molecular orbital obviously.

Keywords: 8-Hydroxyquinolinato manganese complex Absorption spectrum Time-dependent density functional theory

收稿日期 2007-05-30 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(391KB)

[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

▶ 8-羟基喹啉锰配合物

▶ 吸收光谱

▶ 含时密度泛函

本文作者相关文章

▶ 夏树伟

▶ 沙鹏艳

▶ 于良民

▶ 范玉华

▶ 毕彩丰

▶ 杨立荣

▶ 夏树伟

▶ 沙鹏艳

▶ 于良民

▶ 范玉华

▶ 毕彩丰

▶ 杨立荣

PubMed

Article by

Article by

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. Tang C. W., VanSlyke S. A.. Appl. Phys. Lett.[J], 1987, 51: 913—915
2. Zhang X. H., Liu M. W., Wong O. Y., *et al.*. Chem. Phys. Lett.[J], 2003, 369(3/4): 478—482
3. Xie W., Liu S., Zhao Y.. J. Phys. D: Appl. Phys.[J], 2003, 36: 1246—1248
4. Cheng G., Zhao Y., Zhang Y., *et al.*. Appl. Phys. Lett.[J], 2004, 84(2): 4457—4459
5. D'Andrade B. W., Thompson M. E., Forrest S. R.. Adv. Mater.[J], 2002, 14(2): 147—151
6. Hung L. S., Chen C. H.. Mater. Sci. Eng.[J], 2002, 39: 143—222
7. Zhang J. P., Frenking G.. Chem. Phys. Lett.[J], 2004, 394(1—3): 120—125
8. Zhang J. P., Frenking G.. J. Phys.Chem. A[J], 2004, 108: 10296—10301
9. Amati M., Lelj F.. J. Phys. Chem. A[J], 2003, 107: 2560—2569
10. Yang Y. T., Geng H., Yin S. W., *et al.*. J. Phys. Chem. B[J], 2006, 110: 3180—3184
11. KAN Yu-He(阚玉和), ZHU Yu-Lan(朱玉兰), HOU Li-Mei(侯丽梅), *et al.*. Acta Chim. Sin.(化学学报)[J], 2005, 63(14): 1263—1268
12. Lin B. C., Cheng C. P., You Z. Q., *et al.*. J. Am. Chem. Soc.[J], 2005, 127: 66—67
13. Uddina A., Leea C. B., Hua X., *et al.*. J. Cryst. Grow.[J], 2006, 288(1): 115—118
14. Gahungu G., Zhang J. P.. J. Mole. Struc.: Theochem.[J], 2005, 755(1—3): 19—30
15. LIAO Yi(廖奕), SU Zhong-Min(苏忠民), CHEN Ya-Guang(陈亚光), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2003, 24(3): 477—480
16. SU Zhong-Min(苏忠民), CHENG Hong(程红), GAO Hong-Ze(高洪泽), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2000, 21(9): 1416—1421
17. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., *et al.*. Gaussion 03 Revision B.03[CP], Pittsburgh PA: Goussion, Inc., 2003

本刊中的类似文章

1. 乌垠,王金凤,滕云雷,孟祥颖,鲍永利,薄华本,李玉新. 鸢尾苷元和鸢尾苷的电子结构和光谱性质的含时密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2164-2167
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. 薄冬生,任爱民,封继康,杨丽. 3,9-咪唑聚合物基态和激发态性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 955-959
4. 李会学,萧泰. 3-苯基-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑的电子结构和光谱性质的含时密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 747-750
5. 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
6. 赵树魁,孙秀云,方亮,朱玉兰. 双核金属茂合物Zn₂(η⁵-E₅)₂ (E=N, P, As, Sb)电子结构和三阶非线性光学性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1731-1734
7. 李明霞,周欣,潘清江,张红星,付宏刚,孙家锤. 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
8. 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
9. 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
10. 盖志强,于欣,闫冰,陈飞,李瑞,赵书涛,潘守甫,陈德应,王福利,于俊华. 微波硫灯发射光谱的理论模拟[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2262-2266

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-	reviewu	edfwan@163.com	edwau	Buy discount ugg shoes cheap ugg shoes ugg ugg rainier boots ugg usa discount boots ugg 5825 shoes sale ugg sun

