

论文

硅杂环戊二烯衍生物电子结构与光谱性质的理论研究

常青¹, 吴水星¹, 阚玉和², 杨双阳¹, 滕云雷¹, 杨国春¹, 苏忠民¹

1. 东北师范大学化学学院功能材料研究所, 长春 130024;
2. 淮阴师范学院化学系, 江苏省低维材料化学重点建设实验室, 淮安 223300

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)B3LYP/6-31G*方法, 对2,5位取代的硅杂环戊二烯(Silole)系列衍生物进行几何结构优化, 通过计算得到电离能、电子亲和势、空穴抽取能及电子抽取能等相关能量, 并使用TD-DFT方法研究其吸收光谱, 分析相关能量及光谱的变化规律. 采用单组态相互作用(CIS/6-31G*)方法优化得到它们的最低单重激发态(S_1)结构, 在此基础上, 使用TD-DFT方法计算对应的发射光谱. 分析2,5位芳基取代硅杂环戊二烯衍生物(DADPS)激发态与基态的结构差异及原因, 研究前线分子轨道的分布情况, 并讨论发光特征及载流子传输性能. 研究表明, 激发态结构弛豫主要发生在Silole环和直接与2,5位芳基相连的部位; 前线轨道主要分布在Silole环和2,5位芳基上; 二吡咯取代物有望成为空穴传输材料, 二噻吩取代物和二咪唑取代物有望在发光器件中表现出较高的发光效率.

关键词: 硅杂环戊二烯 密度泛函理论 吸收光谱 发光效率

Theoretical Studies on the Electronic Structure and Spectra Properties of 1,1-Dimethyl-2,5-diaryl-3,4-diphenylsilole

CHANG Qing¹, WU Shui-Xing¹, KAN Yu-He², YANG Shuang-Yang¹, TENG Yun-Lei¹, YANG Guo-Chun¹, SU Zhong-Min^{1*}

1. Institute of Functional Material Chemistry, Northeast Normal University, Changchun 130024, China;
2. Department of Chemistry, Jiangsu Province Key Laboratory for Chemistry of Low-Dimensional Materials, Huaiyin Teachers College, Huaian 223300, China

Abstract:

The ground states and low-lying excited states of the four silole derivatives are fully optimized with the density functional theory-B3LYP and configuration interaction singles(CIS). On the basis of the geometries, we computed the ionization potentials(P_1), electron affinities(E_A), reorganization energies, and other energies. And we obtained the absorption and emission spectra with time-dependent density functional theory(TD-DFT) calculation on the ground states and excited states, respectively. The results for the four derivatives are studied in comparison to each other. Then we analyzed the varieties of the energies and the spectra, and explain that pypsy can act as electron injection material, and assign that the hole transfer material can be achieved based on prspr, finally point out that thsth and fusfu can act as emitting materials in bulk state.

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(369KB)

[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

▶ 硅杂环戊二烯

▶ 密度泛函理论

▶ 吸收光谱

▶ 发光效率

本文作者相关文章

▶ 常青

▶ 吴水星

▶ 阚玉和

▶ 杨双阳

▶ 滕云雷

▶ 杨国春

▶ 苏忠民

▶ 常青

▶ 吴水星

▶ 阚玉和

▶ 杨双阳

▶ 滕云雷

▶ 杨国春

▶ 苏忠民

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Keywords: Silole Density functional theory Absorption spectrum Luminescent efficiency

收稿日期 2007-05-09 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 苏忠民

作者简介:

参考文献:

1. Tang C. W., Van Slyke S. A.. Appl. Phys. Lett.[J], 1987, 51: 913—915
2. Burroughes J. H., Bradley D. D. C., Friend R. H., *et al.*. Nature[J], 1990, 347: 539—541
3. Sheats J. R., Antoniadis H., Hueschen M., *et al.*. Science[J], 1996, 273: 884—888
4. Hung L. S., Chen C. H.. Mater. Sci. Eng. R.[J], 2002, 39: 143—222
5. Bredas J. L., Beljonne D., Coropceanu V., *et al.*. Chem. Rev.[J], 2004, 104: 4971—5003
6. Veinot J. G. C., Marks T. J.. Acc. Chem. Res.[J], 2005, 38: 632—643
7. Patel N. K., Ciná S., Burroughes J. H.. IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.[J], 2002, 8: 346—361
8. Zhang H., Huo C., Zhang J., *et al.*. Chem. Commun.[J], 2006: 281—283
9. Barth S., Müller P., Riel H., *et al.*. J. Appl. Phys.[J], 2001, 89: 3711—3719
10. SU Zhong-Min(苏忠民), GAO Hong-Ze(高洪泽), CHENG Hong(程红), *et al.*. Science in China, Series B(中国科学, B辑)[J], 2001, 31: 16—27
11. Lin B. C., Cheng C. P., You Z. Q., *et al.*. J. Am. Chem. Soc.[J], 2005, 127: 66—67
12. Garbuzov D. Z., Bulovi V., Burrows P. E., *et al.*. Chem. Phys. Lett.[J], 1996, 249: 433—437
13. Yamaguchi S., Jin R. Z., Tamao K.. J. Am. Chem. Soc.[J], 1999, 121: 2937—2938
14. Roques N., Gerbier P., Schatzschneider U., *et al.*. Chem. Eur. J.[J], 2006, 12: 5547—5562
15. Sartin M. M., Boydston A. J., Pagenkopf B. L., *et al.*. J. Am. Chem. Soc.[J], 2006, 128: 10163—10170
16. Yamaguchi S., Iimura K., Tamao K.. Chem. Lett.[J], 1998, 27: 89—90
17. Yamaguchi S., Endo T., Uchida M., *et al.*. Chem. Eur. J.[J], 2000, 6: 1683—1692
18. Yamaguchi S., Endo T., Uchida M., *et al.*. Chem. Lett.[J], 2001, 30: 98—99
19. Chen H. Y., Lam J. W. Y., Luo J. D., *et al.*. Appl. Phys. Lett.[J], 2002, 81: 574—576
20. Luo J. D., Xie Z. L., Lam J. W. Y., *et al.*. Chem. Commun[J], 2001: 1740—1741
21. Chen J. W., Law C. C. W., Lam J. W. Y., *et al.*. Chem. Mater.[J], 2003, 15: 281—283
22. Yamaguchi S., Tamao K.. Bull. Chem. Soc. Jpn.[J], 1996, 69: 2327—2334
23. Risko C., Kushto G. P., Kafati Z. H., *et al.*. J. Chem. Phys.[J], 2004, 121: 9031—9038
24. Yin S., Yi Y., Li Q., *et al.*. J. Phys. Chem. A[J], 2006, 110: 7138—7143
25. Yin S., Peng Q., Shuai Z.. Phys. Rev. B[J], 2006, 73: 205409—205413
26. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., *et al.*. Gaussian 03, Revision B.01[CP], Pittsburgh PA: Gaussian Inc., 2003
27. Kan Y. H., Yang G. C., Yang S. Y., *et al.*. Chem. Phys. Lett.[J], 2005, 418: 302—306
28. Yang S. Y., Kan Y. H., Yang G. C., *et al.*. Chem. Phys. Lett.[J], 2005, 429: 180—184
29. WANG Ji-Fen(王继芬), FENG Ji-Kang(封继康), REN Ai-Min(任爱民), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2004, 25(4): 676—680
30. Yang G. C., Su T., Shi S. Q., *et al.*. J. Phys. Chem. A[J], 2007, 111: 2739—2744
31. Marcus R. A.. Rev. Mod. Phys.[J], 1993, 65: 599—610
32. Yang G. C., Liao Y., Su Z. M., *et al.*. J. Phys. Chem. A[J], 2006, 110: 8758—8762
33. Xu X. J., Liao Y., Yu G., *et al.*. Chem. Mater.[J], 2007, 19: 1740—1748
34. Uchida M., Izumizawa T., Nakano T., *et al.*. Chem. Mater.[J], 2001, 13: 2680—2683
35. Yamaguchi S., Itami Y., Tamao K.. Organometallics[J], 1998, 17: 4910—4916
36. Yamaguchi S., Tamao K.. J. Chem. Soc., Dalton Trans.[J], 1998: 3693—3702
37. Hsu C. P., Hirata S., Head G. M.. J. Phys. Chem. A[J], 2001, 105: 451—458

本刊中的类似文章

1. 乌垠,王金凤,滕云霄,孟祥颖,鲍永利,薄华本,李玉新. 鸢尾昔元和鸢尾昔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. 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. 王鹏,高金森,董坤,徐春明,刘靖疆.三氯化铝烷基氯化咪唑盐和红外光谱的模拟计算[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1505-1508
5. 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
6. 陈建成,邢小鹏,唐紫超,高振.二元合金团簇 $\text{CoGe}_n^-(n=1\sim 12)$ 的结构和稳定性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 535-538
7. 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
8. 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
9. 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
10. 赵丽娇,钟儒刚,戴乾圆. β -甲基亚硝基咪唑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
11. 石绍庆,杨国春,竇卓,苏忠民. $[\text{M}_m\text{O}_m(\text{C}_{25}\text{N}_4\text{H}_{18})_n]^{2-}$ ($\text{M}=\text{W}, \text{Mo}; n=1, 2; m=17,18$)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
12. 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
13. 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
14. 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
15. 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
16. 李岩,封继康,任爱民,杨丽.苄与苯并硒化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
17. 申勇立,郝金库,曹映玉,杨毓?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
18. 熊杰明,龚良发,李前树.杂硼原子簇 B_6X^- ($\text{X}=\text{N}, \text{P}, \text{As}, \text{Sb}, \text{Bi}$)稳定性和芳香性研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1968-1971
19. 杨静,张绍文,李前树. $\text{CH}_n\text{F}_{4-n}$ 与 O_3 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
20. 李明霞,周欣,潘清江,张红星,付宏刚,孙家锺.联吡啶钌配合物 $[\text{Ru}(\text{Htcterpy})\text{X}_3]^{3-}$ ($\text{X}=\text{NCS}, \text{CN}, \text{Cl}$)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
21. 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
22. 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
23. 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
24. 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
25. 周欣,孟烜宇,李明霞,潘清江,张红星.配合物 $[\text{N},\text{N}'\text{-二(亚水杨基)-1,2-乙二胺}]\text{Pt}(\text{II})$ 光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1239-1242
26. 夏树伟,沙鹏艳,于良民,范玉华,毕彩丰,杨立荣.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[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1234-1238
27. 纪艺琼,王墨姝,王兰芬,包鹏,刘扬.稳定直线型硝酮- O_2^- 加合物的构型因素解析[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1801-1803
28. 陈健,谭凯,林梦海,张乾二.过渡金属氧化物 $(\text{M}_2\text{O}_5)^+$ $_{m=1,2}$ ($\text{M}=\text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}$)与 C_2H_4 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
29. 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
30. 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
31. 王一,王永,韩克利.非血红素配合物 $[\text{FeIV}(\text{O})(\text{TMC})(\text{NCMe})]^{2+}$ 与 $[\text{FeIV}(\text{O})(\text{TMCS})]^+$ 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
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 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

37. 徐文国, 白王军, 卢士香. $\text{SeH}_n/\text{SeH}_n^- (n=1\sim 5)$ 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
38. 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
39. 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
40. 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
41. 杨兵, 马於光, 沈家骢. n -共轭分子堆积、光电性能与超分子调控[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2643-2658
42. 覃昊, 李欣, 孟祥丽, 强亮生. O_3 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
43. 阚玉和, 李强. C_{62} 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
44. 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
45. 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
46. 杨玉环, 潘纲, 马骁楠, 陈灏, 张美一, 何广智, 李薇. Zn(II)在 TiO_2 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
47. 薛严冰, 唐祯安. CO在 SnO_2 (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
48. 舒鑫, 周欣, 潘清江, 李明霞, 张红星, 孙家锤. 具有Lindqvist结构的 $[\text{Mo}_6\text{O}_{19}]^{2-}$ 化合物及其二钨取代物的电子性质和稳定性的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(5): 1014-1017

文章评论

| 序号 | 时间 | 反馈人 | 邮箱 | 标题 | 内容 |
|----|-------|------------|----------------|--------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1 | 2009- | reviewuinc | edfwan@163.com | edwaua | Buy discount ugg cheap ugg shoes ugg ugg rainier boots ugg usa discount ugg 5825 shoes sale ugg su |