

Au(I)炔基配合物激发态性质的理论研究

矫玉秋; 孙强; 范镛

中国石油大学(北京)数理系, 北京 102249; 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130022

摘要:

用MP2方法和CIS方法分别优化了Au(I)炔基配合物及相应炔烃的基态和激发态的结构. 计算结果表明, 在基态, 分子有向中间收缩的趋势, Au(I)的修饰作用减弱了配体内部原子间的成键作用. 随着分子链长增长, Au(I)与配体间的相互作用减弱; 激发态的电子跃迁减弱了, Au(I)与配体间的相互作用, 并且这种影响随着分子链增长而更加明显. 计算得出Au(I)炔基配合物体系的荧光发射光谱并发现其独特的发光性质, 说明取代H原子的一AuPH₃比—H更具有离子性.

关键词: [Au(PH₃)]⁺ 激发态 理论研究 荧光

收稿日期 2006-03-08 修回日期 2006-04-30 网络版发布日期 2006-10-11

通讯作者: Email: napoleonest@yahoo.com.cn.

本刊中的类似文章

1. 彭春玉; 周海晖; 曾伟; 焦树强; 罗胜联; 旷亚非. 影响反相微乳液导电性能的因素[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 409-413
2. 卢祥国; 王伟. Al³⁺交联聚合物分子构型及其影响因素[J]. 物理化学学报, 2006, 22(05): 631-634
3. 许刚; 曹楚南; 林海潮; 张鉴清. In³⁺与Ga³⁺对纯铝在KOH溶液中电化学行为的影响[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 27-32
4. 曹志坚; 张俊松; 徐娟; 陆天虹; 李邨; 黄晓华. 铽-聚二甲基硅氧烷配合物的荧光特性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 369-372
5. 陈伟; 宋家庆; 苏勉曾; 刘密兰; 金明芝. 发光材料BaFBr:Eu的穆斯堡尔谱研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 692-697
6. 乔彬; 唐子龙; 张中太; 陈雷. ZnGa₂O₄:Cr³⁺红色荧光粉的光致及电致发光性能[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1291-1295
7. 吕玲玲; 王永成. Au⁺(¹S, ³D)与N₂O(¹Σ⁺)反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 265-269
8. 熊裕华; 李凤仪. Fe³⁺掺杂TiO₂光催化降解聚乙烯薄膜的研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(06): 607-611
9. 李越湘; 王添辉; 彭绍琴; 吕功煊; 李树本. Eu³⁺、Si⁴⁺共掺杂TiO₂光催化剂的协同效应[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1434-1439
10. 高颖; 郭冰; 万丽娟; 刘长鹏; 邢巍; 陆天虹. Ho³⁺对吸附CO电化学氧化的促进作用[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1108-1111
11. 褚道葆; 王凤武; 魏亦军; 姚文俐; 李晓华. 纳米TiO₂-Pt修饰电极的制备及电催化活性[J]. 物理化学学报, 2004, 20(02): 182-185
12. 陈婷婷; 黄晓华; 杜江燕; 冯玉英; 刘长鹏; 邢巍; 陆天虹. La³⁺或Eu³⁺与微过氧化物酶-8相互作用强弱研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 887-891
13. 王喜贵; 吴红英; 翁诗甫; 吴瑾光. Tb掺杂SiO₂-B₂O₃-NaF玻璃的制备及发光性质[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 398-402
14. 沈雪松; 刘义; 侯安新; 赵儒铭; 屈松生. Pr³⁺或La³⁺与克拉霉素对大肠杆菌的协同作用[J]. 物理化学学报, 2003, 19(06): 560-563
15. 李金环; 康万利; 闫文华; 郭伊荥; 高洪峰; 刘忠和. Eu³⁺掺杂TiO₂纳米晶的制备及光催化降解部分水解聚丙烯酰胺[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1030-1034
16. 张国鼎; 于秀芳. 量热法研究Cr³⁺水解聚合作用的热力学性质[J]. 物理化学学报, 1995, 11(08): 766-768
17. 袁剑辉; 程玉民; 张振华. Ca₃Al₂Ge₃O₁₂:Cr³⁺的光谱性质及晶场参数计算[J]. 物理化学学报, 2005, 21(09): 1059-1062
18. 甘礼华; 岳天仪; 陈龙武; 李光明; 周斌. β-FeOOH气凝胶的制备及表征[J]. 物理化学学报, 1997, 13(01): 48-51
19. 李文; 殷元骥; 冯良波; 郑培菊. ZrO₂催化剂表面Zr³⁺离子与F-T反应中异丁烯选择性的相关性[J]. 物理化学学报, 1996, 12(12): 1074-1078
20. 田西林, 陶杰, 陶海军, 包祖国, 李转利, 张焱焱, 汤育欣. 淬火处理对TiO₂纳米管阵列电极性能影响[J]. 物理化学学报, 2009, 25(06): 1111-1116

扩展功能

本文信息

PDF(261KB)

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

▶ [Au(PH₃)]⁺

▶ 激发态

▶ 理论研究

▶ 荧光

本文作者相关文章

▶ 矫玉秋

▶ 孙强

▶ 范镛

21. 陈威, 董新法, 陈之善, 陈胜洲, 林维明. 可见光下 Fe^{3+} 掺杂对 $\text{K}_2\text{La}_2\text{Ti}_3\text{O}_{10}$ 分解水制氢性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1107-1110
 22. 陈玉娟;卓克垒;康磊;徐四姣;王键吉. 278.15-313.15 K下糖-水二元体系的介电常数[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 91-96
 23. 李盼来;杨志平;王志军;熊志军;郭庆林. $\text{Sr}_2\text{SiO}_4:\text{Eu}^{3+}$ 发光材料的制备及其光谱特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 179-182
 24. 尤洪鹏;洪广言. $\text{Al}_2\text{O}_3-\text{B}_2\text{O}_3-\text{Eu}_2\text{O}_3$ 体系的振动光谱和发光特性[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 150-155
 25. 杜凤沛;陈兰;蔡遵生;潘荫明;赵学庄. H+ClF体系的准经典轨线研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 593-598
 26. 夏旭兵;段春迎;朱龙根;曹红;游京晶. 茂铁基多核配合物猝灭 $^* \text{Cr}(\text{bpy})^{3+}_3$ 发光过程研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 268-272
 27. 龚惠皓;王寿祥;许海涵. 以二丙酮醇为有机物 Ce^{3+} 为催化剂的BR型化学振荡反应的研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 184-190
 28. 李强;李开喜;孙国华;范慧;谷建宇. 一种新型氧化还原电解液电化学电容器体系[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1445-1450
 29. 苏碧桃 孙佳星 胡常林 张小红 费鹏 雷自强. Fe^{3+} 掺杂 TiO_2 光催化纤维材料的制备及表征[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
-