

吡啶酮系偶氮类化合物可见吸收光谱的预测

刘军娜; 陈志荣; 袁慎峰

浙江大学化学工程系, 杭州 310027

摘要:

利用密度泛函的B3LYP方法, 在6-311G*基组水平对吡啶酮系偶氮类化合物进行构型优化, 并进行了自然键轨道(NBO)分析, 然后用TDDFT方法和ZINDO/S方法分别计算了它们的可见吸收光谱, 结果均与实验值十分吻合. 通过对比发现, 对于最高吸收波长的计算, ZINDO/S能以较快的速度得到较好的结果. 在用ZINDO/S计算的过程中, 回归分析发现 $\pi-\pi$ 重叠加权因子($OWF_{\pi-\pi}$)与染料分子吡啶环上两个羰基氧原子平均电荷 Z_O 有较好的线性关系: $OWF_{\pi-\pi} = 0.11425 - 1.04178Z_O$, 这一关系不仅可从量子化学的角度进行解释, 而且可用于同类染料可见吸收光谱的预测. 分子轨道的研究表明, 这些化合物的最高可见吸收波长主要对应着共轭体系中给电子体到受电子体的电子跃迁.

关键词: 吡啶酮系偶氮类化合物 自然键轨道 TDDFT ZINDO/S

收稿日期 2004-09-13 修回日期 2004-11-29 网络版发布日期 2005-04-15

通讯作者: 刘军娜 Email: liujunna@zju.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(259KB)

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

▶ 吡啶酮系偶氮类化合物

▶ 自然键轨道

▶ TDDFT

▶ ZINDO/S

本文作者相关文章

▶ 刘军娜

▶ 陈志荣

▶ 袁慎峰