

引用信息: LUO Shi-Xia; ZHANG Xiao-Yi; ZHANG Si-Ting; ZHU Huai-Wu; HU Ji-Wei; WEI Gang. Acta Phys. -Chim. Sin., 2008, 24(08): 1471-1476 [罗世霞;张笑一;张思亭;朱淮武;胡继伟;卫钢. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1471-1476]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

巯基偶氮苯单分子电子传输的取代基效应

罗世霞; 张笑一; 张思亭; 朱淮武; 胡继伟; 卫钢

贵州师范大学理学院, 贵阳 550001; 贵州省山地环境信息系统和生态环境保护重点实验室, 贵阳 550001; CSIRO Materials Science and Engineering, PO Box 218, Lindfield, NSW2070, Australia

摘要:

用密度泛函理论B3LYP/6-31G**计算巯基偶氮苯分子及分子离子的空间构型和电子结构, 研究取代基对巯基偶氮苯单分子电子传输的影响. 结果表明, 拉电子基(-COOH、-NO₂)的引入, 可以提高巯基偶氮苯单分子电子传输体系的稳定性, 使体系LUMO的离域性增高、S原子反应活性增强、HOMO-LUMO能隙显著减小, 进而降低电子传输能垒, 有利于分子电子传输. 相同取代基的分子离子比分子具有更小的HOMO-LUMO能隙, S—Au键更易形成, 金属-分子-金属结构的电子传输性更强.

关键词: 巯基偶氮苯 电子传输 密度泛函理论 电子结构

收稿日期 2008-04-14 修回日期 2008-05-19 网络版发布日期 2008-06-26

通讯作者: 张笑一 Email: chemlsx@163.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(773KB)

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

▶ 巯基偶氮苯
▶ 电子传输
▶ 密度泛函理论
▶ 电子结构

本文作者相关文章

▶ 罗世霞
▶ 张笑一
▶ 张思亭
▶ 朱淮武
▶ 胡继伟
▶ 卫钢