

PBO聚合物紫外吸收光谱中环境因素影响的理论研究

冯东东; 庄启昕; 吴平平; 韩哲文

华东理工大学材料科学与工程学院, 超细材料制备与应用教育部重点实验室, 上海 200237

摘要:

芳杂环液晶高分子聚对亚苯基苯并二噁唑(PBO, poly(p-phenylene-2,6-benzobisoxazole))的共轭平面结构赋予其光电性能而备受关注. 实验结果表明其光电性能受其所处环境状态影响. 通过量子化学计算研究发现, PBO无论固态还是溶液状态的最大紫外吸收均较其本征值有所红移. 对PBO二聚体模型以及其在强质子酸中所具有的质子化形态模型的紫外吸收光谱计算模拟的结果表明, PBO聚集态时的分子间相互作用, 以及溶液中质子化效应均导致红移. 质子化模型所得紫外吸收光谱能很好地阐释溶液中具有精细结构实测的紫外吸收光谱.

关键词: PBO 量子化学计算 紫外吸收光谱 质子化效应

收稿日期 2004-06-29 修回日期 2004-08-12 网络版发布日期 2005-01-15

通讯作者: 韩哲文 Email: zhwhan@ecust.cn

本刊中的类似文章

1. 李玲霞; 吴霞宛; 王洪儒; 张志萍; 余昊明. 高频介质系统介电性能与相组成的定量关系分析[J]. 物理化学学报, 2004, 20(04): 396-399
2. 曹江林; 吴祖成; 李红霞; 张鉴清. PbO_2 阳极在硫酸溶液中的析氧失活行为[J]. 物理化学学报, 2007, 23(10): 1515-1519

扩展功能

本文信息

PDF(1869KB)

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

▶ PBO

▶ 量子化学计算

▶ 紫外吸收光谱

▶ 质子化效应

本文作者相关文章

▶ 冯东东

▶ 庄启昕

▶ 吴平平

▶ 韩哲文