

4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(*N,N*-二苯基-4-乙烯基苯胺基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质

崔明侠;董士红;王文亮;尹世伟;吕剑

陕西省大分子科学重点实验室, 陕西师范大学化学与材料科学学院, 西安 710062; 西安近代化学研究所, 西安 710065

摘要:

分别采用B3LYP/6-31G(d)和CIS/6-31G(d)方法对4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(*N,N*-二苯基-4-乙烯基苯胺基)联苯(A)及其二氟取代衍生物(B-F)的基态(S₀)和单重激发态(S₁)的几何构型进行了全优化, 计算获得了电离势IP、电子亲和势EA等相关数据, 并采用含时密度泛函(TD-DFT)方法计算了上述化合物的电子吸收和荧光发射光谱. 研究表明, 化合物A及二氟取代衍生物B-F在469-474 nm蓝光区域主发射峰的强度远远大于372-387 nm范围的次发射峰, 说明此类化合物具有纯度较高的发射光谱; 主链苯环上的二氟取代(B, C和D)使最低空轨道(LUMO)能级明显降低, 有利于提高电子注入; 芳胺基苯环上的二氟取代(D和E)使分子最高占据轨道(HOMO)能级明显降低, 电离势增加, 能隙变大, 有利于抑制空穴越过发光层向电子传输层输运, 减少界面处激基复合物的形成, 同时起到光谱蓝移的效果; 既是主链苯环上也是芳胺基苯环上的二氟取代衍生物D更有利于平衡电子-空穴的注入, 应该具有更加优良的发光性质.

关键词: 联苯乙烯基衍生物 密度泛函理论 空穴阻挡 光谱性质 电子结构

收稿日期 2008-09-08 修回日期 2008-10-31 网络版发布日期 2008-12-19

通讯作者: 王文亮 Email: wlwang@snnu.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(703KB)

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

▶ 联苯乙烯基衍生物

▶ 密度泛函理论

▶ 空穴阻挡

▶ 光谱性质

▶ 电子结构

本文作者相关文章

▶ 崔明侠

▶ 董士红

▶ 王文亮

▶ 尹世伟

▶ 吕剑