

光谱学与光谱分析

二芳基马来酸酐吸收光谱的计算研究

王 骐¹, 刘 颖^{2, 3}, 张密林², 刘 跃^{1, 3*}

1. 哈尔滨工业大学光电子技术研究所可调谐激光技术国家级重点实验室, 黑龙江 哈尔滨 150001
2. 哈尔滨工程大学化工学院, 黑龙江 哈尔滨 150001
3. 中国矿业大学化工学院, 江苏 徐州 221008

收稿日期 2003-12-1 修回日期 2004-4-9 网络版发布日期 2005-5-26

摘要 在B3LYP/6-311++G(3df, 3pd)//b3LYP/6-31G(d)和TD/6-31G(d)//B3LYP/6-31G(d)水平上对二芳基马来酸酐的电子吸收光谱进行了研究。2,3-(2,4-二甲基噻吩-3)马来酸酐的开式结构和闭式结构的 S_1 , S_2 和 S_3 跃迁的计算结果分别为390, 360.5, 339.4; 584.6, 395.8, 370.2 nm; 与类似物2,3-(2,4,5-三甲基噻吩-3)马来酸酐的开式结构和闭式结构的 S_1 和 S_2 , 实验值390, 331; 552, 386 nm一致。振子相对强度计算结果与吸收峰强度一致。

关键词 [2,3-\(2,4-二甲基噻吩-3\)马来酸酐](#) [电子吸收光谱](#) [理论计算](#)

分类号 [O641.1](#)

DOI:

通讯作者:
刘 跃

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(267KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“2,3-\(2,4-二甲基噻吩-3\)马来酸酐”的 相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [王 骐](#)

· [刘 颖](#)

·

· [张密林](#)

· [刘 跃](#)

·