

光谱学与光谱分析

1,8-萘啉衍生物分子结构与理论电子光谱

迟绍明^{1, 2, 3}, 李立^{1, 2}, 陈勇¹, 傅文甫^{1, 2*}

1. 中国科学院理化技术研究所, 北京 100190
2. 中国科学院研究生院, 北京 100049
3. 云南师范大学化学化工学院, 云南 昆明 650092

收稿日期 2009-3-23 修回日期 2009-6-26 网络版发布日期 2010-3-1

摘要 采用密度泛函理论B3LYP/6-31G(d)方法优化计算4种2,4-二甲基-7-氨基-1,8-萘啉衍生物分子结构,探讨了其分子结构与前线分子轨道、能量的关系。运用含时密度泛函理论(TD-DFT)计算了它们的气相和溶液相电子光谱,研究了溶剂模型和计算方法对理论光谱的影响。计算结果表明,4种萘啉衍生物均含离域 π 键,HOMO与LUMO能级差 ΔE 较小,且大小顺序与它们的最大吸收波长实验值变化趋势一致。理论电子光谱证实,1,8-萘啉衍生物的吸收光谱随共轭性增强逐渐红移,最大吸收源自于HOMO \rightarrow LUMO的 $\pi\rightarrow\pi^*$ 电子跃迁。PCM-B3LYP/6-31+G(d)计算结果与实验值相比,最大吸收波长分别相差2.6, 10.3, 5.3和6.9 nm,能量相差0.03, 0.09, 0.04和0.08 eV。因此,在考虑溶剂效应条件下,采用B3LYP/6-31(d)方法优化分子构型和TD-DFT方法获得的电子光谱与实验光谱具有一致性。

关键词 [1,8-萘啉衍生物](#) [理论光谱](#) [吸收光谱](#) [TDDFT](#)

分类号 [O641.1](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2010\)03-0586-05](#)

通讯作者:

傅文甫 fuwf@mail.ipc.ac.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1002KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“1,8-萘啉衍生物”
的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [迟绍明](#)

·

· [李立](#)

·

· [陈勇](#)

· [傅文甫](#)

·