

研究论文

具有膦配体的异核d10-d8配合物结构: Au-Pt配合物激发态性质的理论研究

郭元茹*, a 潘清江b

(a东北林业大学材料科学与工程学院 哈尔滨 150040)

(b黑龙江大学化学化工与材料学院物理化学实验室 哈尔滨 150080)

收稿日期 2008-3-28 修回日期 2008-5-26 网络版发布日期 2009-1-14 接受日期 2008-9-9

摘要

采用MP2和DFT方法优化一系列d10-d8配合物, $[MM'(CN)_2(PH_2CH_2PH_2)_2] + [M = AuI, M' = PtII (1), PdII (2), NiII (3); M' = PtII, M = AgI (4), CuI (5)]$ 的基态结构, 其中BH&H方法得到的金属间距离最接近相应的实验值. 对于经典Au-Pt配合物: 使用多种方法优化 $[AuPt(CN)_2(PMe_2CH_2PMe_2)_2] + (1Me)$ 的结构以验证取代基近似的合理性, 采用单激发组态相互作用方法优化了1的两个低能三重激发态并且考查了环境效应(抗衡离子和溶剂分子)对其较低能激发态发射光谱的影响. 计算结果显示1的两个低能三重激发态分别产生399和234 nm发射, 属于金属中心(Metal-centered, MC)跃迁和分子内电荷转移(Intramolecular Charge Transfer, ICT)的混合性质; 由于电子激发到成键轨道, 使得激发态金属间距离相对基态变短; 环境效应使得较低能的MC/ICT激发态的发射光谱红移, 如1的发射在473 nm处, 与实验测得 $[AuPt(CN)_2(PCy_2CH_2PCy_2)_2]$ 的发射在451 nm固体发射相对应.

关键词

[异核d10-d8配合物](#) [激发态](#) [环境效应](#) [从头算和密度泛函方法](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

郭元茹 gyrhit@yahoo.com.cn

作者个人主页:

郭元茹*; a 潘清江b

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF \(488KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)

▶ [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 “](#)

[异核d10-d8配合物” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [郭元茹, 潘清江](#)