



## Ru(II)和Ru(III)配合物 $[\text{Ru}(\text{bpy})(\text{PH}_3)(-\text{C}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{NO}_2-p)\text{Cl}]^m$ ( $m=0, +1$ )的光谱性质的密度泛函-含时密度泛函理论研究

### DFT and TDDFT Investigations on the Spectroscopic Properties of Ru(II) and Ru(III) Complexes: $[\text{Ru}(\text{bpy})(\text{PH}_3)(-\text{C}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{NO}_2-p)\text{Cl}]^m$ ( $m=0, +1$ )

摘要点击: 15 全文下载: 7

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

中文关键词: 钌配合物; 电荷转移; 吸收光谱; 密度泛函; 含时密度泛函

英文关键词: ruthenium complexes; charge transfer; absorption spectra; DFT; TDDFT

基金项目:

作者 单位

李明霞 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023; 黑龙江大学化学化工与材料学院, 哈尔滨 150080

周欣 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

张红星 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

付宏刚 黑龙江大学化学化工与材料学院, 哈尔滨 150080

孙家钟 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

中文摘要:

我们利用DFT中的B3LYP方法优化了Ru(II)配合物和氧化的Ru(III)配合物 $[\text{Ru}(\text{bpy})(\text{PH}_3)(-\text{C}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{NO}_2-p)\text{Cl}]^m$  [ $\text{bpy}=2, 2'$ -bipyridine;  $m=0(1), +1(1^+)$ ]的基态几何结构, 得到的几何参数与实验结果吻合的很好。采用TDDFT方法, 得到了配合物1和 $1^+$ 的激发态电子结构和电子吸收光谱。研究表明, 配合物1和 $1^+$ 随着氧化过程的发生, 光谱性质也发生变化, Ru(II)配合物的低能吸收被指认为MLCT/LLCT混合跃迁, 而氧化的Ru(III)配合物 $1^+$ 的低能吸收具有LMCT跃迁性质。

英文摘要:

The ruthenium(II) and ruthenium(III) complexes  $[\text{Ru}(\text{bpy})(\text{PH}_3)(-\text{C}\equiv\text{CC}_6\text{H}_4\text{NO}_2-p)\text{Cl}]^m$  [ $\text{bpy}=2, 2'$ -bipyridine;  $m=0(1), +1(1^+)$ ] are investigated theoretically to explore their electronic structures and spectroscopic properties. The ground-state geometry structures of 1 and  $1^+$  are optimized by the DFT method (B3LYP). The calculated geometry parameters are in agreement with experimental values. Absorption spectra for complexes 1 and  $1^+$  are predicted at the TDDFT/B3LYP level. For complex 1, the low-energy absorptions have a mixed MLCT/LLCT character, whereas that of  $1^+$  is LMCT nature.

[关闭](#)

您是第149248位访问者

主办单位: 中国化学会 单位地址: 南京大学化学楼

服务热线: (025)83592307 传真: (025)83592307 邮编: 210093 Email: [wjhx@netra.nju.edu.cn](mailto:wjhx@netra.nju.edu.cn)

[本系统由北京勤云科技发展有限公司设计](#)