

## 研究论文

### 3-(3'-吡啶基)-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑衍生物基态和激发态性质

李会学; 唐惠安; 杨声; 萧泰

天水师范学院生物化学学院, 甘肃 天水 741000; 西北师范大学化学化工学院, 兰州 730070

#### 摘要:

用密度泛函B3LYP方法对3-(3'-吡啶基)-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑衍生物(芳基为苯基、3-吡啶基和苯乙烯基)进行基态几何构型全优化, 计算分子的电离势IP和电子亲和势EA等相关能量, 并用Zerner间略微分重叠(ZINDO)和含时密度泛函(TDDFT)方法计算吸收光谱, 用单组态相互作用方法(CIS)优化三种化合物分子的S1激发态结构, 分析其能量与发射光谱的关系, 计算溶剂中分子的吸收和发射光谱, 并与实验结果对照. 计算结果表明, 从3-(3'-吡啶基)-6-苯基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑分子(化合物A)到3-(3'-吡啶基)-6-(3'-吡啶基)-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑分子(化合物B)以及3-(3'-吡啶基)-6-对乙烯苯基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑分子(化合物C)的电子亲和势依次增大, 愈来愈容易接受电子, 吸收光谱和发射光谱红移.

关键词: 噻二唑衍生物 发光性质 密度泛函理论

收稿日期 2007-05-29 修回日期 2007-06-25 网络版发布日期 2007-08-23

通讯作者: 李会学 Email: li\_hx2001@126.com

#### 本刊中的类似文章

1. 曹晓燕;吴伟;王东;葛茂发;王殿勋. 1,2,5-噻二唑衍生物电子结构的紫外光电子能谱研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 491-495

扩展功能

本文信息

PDF(1242KB)

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

▶ 噻二唑衍生物

▶ 发光性质

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 李会学

▶ 唐惠安

▶ 杨声

▶ 萧泰