

研究论文

3,9-咔唑聚合物基态和激发态性质的理论研究

薄冬生¹, 任爱民¹, 封继康^{1,2}, 杨丽¹

1. 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室,
2. 吉林大学化学学院, 长春 130023

收稿日期 2006-4-28 修回日期 网络版发布日期 2007-4-23 接受日期

摘要 用密度泛函B3LYP方法对3,9-咔唑低聚物[(3,9-carbazole)_n(n=1,2,3,4,6,8)]体系进行了全优化, 计算得到电离能、电子亲合势、空穴抽取能及电子抽取能等相关能量, 用ZINDO和TD-DFT方法计算得到吸收光谱; 分析了各种能量的变化及光谱规律. 用外推法由低聚物分子的各种性质与聚合度n相联系得到高聚物的性质, 将所得结果与2,7-咔唑(2,7-carbazole)及类似聚合物进行了比较分析. 结果表明, 3,9位聚合的咔唑整体共轭程度降低, 光谱蓝移, 其IP值和聚芴相近, 可以作为空穴接受材料应用于多层电子荧光器件的空穴传输层. 用CIS方法进行优化得到部分分子的S1激发态结构, 用ZINDO和TD-DFT方法得到对应的发射光谱.

关键词 [咔唑](#) [密度泛函](#) [吸收光谱](#) [发光性质](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

任爱民 aimin_ren@email.jlu.edu.cn

作者个人主页: 薄冬生¹; 任爱民¹; 封继康^{1,2}; 杨丽¹

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(468KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“咔唑”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [薄冬生, 任爱民, 封继康, 杨丽](#)