

研究论文

[Au(PH<sub>3</sub>)]<sup>+</sup>修饰下苯的激发态性质的理论研究

矫玉秋<sup>1</sup>, 潘清江<sup>1,2</sup>, 张红星<sup>1</sup>

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, 长春 130021;
2. 黑龙江大学化学化工与材料学院, 哈尔滨 150080

收稿日期 2005-6-2 修回日期 网络版发布日期 2008-2-27 接受日期

摘要 用MP2和CIS方法分别优化了H<sub>3</sub>PAuPh(a)、对位(H<sub>3</sub>PAu)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>(b)和间位(H<sub>3</sub>PAu)<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub>(c)的基态和激发态结构. 计算结果表明, [Au(PH<sub>3</sub>)]<sup>+</sup>的引入使Au(I)配合物的苯环上的电子云密度降低, 削弱了苯基内C—C键的成键作用. 计算得到配合物a~c的最低能量磷光发射分别为443, 461和429 nm, 均属于苯基为 $n^* \rightarrow \pi$ 跃迁本质, 并伴有Au(6p)→ $\pi$ (Ph)和Au(6p)→Au(5d)电荷转移性质. 与苯的最低能量磷光发射(413 nm)相比揭示了配合物a~c的发光过程是[Au(PH<sub>3</sub>)]<sup>+</sup>修饰的 $n^* \rightarrow \pi$ 发光机制.

关键词 [激发态](#) [磷光](#) [从头计算](#) [Au\(I\)配合物](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

张红星 [zhanghx@mail.jlu.edu.cn](mailto:zhanghx@mail.jlu.edu.cn)

作者个人主页: 矫玉秋<sup>1</sup>; 潘清江<sup>1,2</sup>; 张红星<sup>1</sup>

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(520KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“激发态”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· 矫玉秋, 潘清江, 张红星