

研究论文

酞菁基态和激发态的计算

宋争林; 张复实; 陈锡侨; 赵福群

清华大学化学系, 北京 100084; 澳门大学科技学院, 澳门 3001

摘要:

采用DFT方法在B3LYP/6-31G水平上得到了H₂Pc(酞菁)的优化结构,并在此基础上采用TDDFT方法计算了激发态.通过与H₂P(卟吩)、H₂Pz(四氮卟吩)和H₂TBP(四苯并卟啉)的比较,研究了苯并取代以及氮杂取代对H₂Pc的分子轨道和激发态的影响,上述取代效应使得H₂Pc的HOMO-1(132 b1u)和HOMO-3(130 b1u)轨道发生了翻转,氮杂取代的影响尤其明显.这两种取代都使得Q带振子强度增大,在这四种化合物中,H₂Pc的振子强度最大.TDDFT计算结果与实验值符合得较好.

关键词: 酞菁 密度泛函方法(DFT) 含时密度泛函方法(TDDFT) 基态 激发态

收稿日期 2002-05-29 修回日期 2002-07-24 网络版发布日期 2003-02-15

通讯作者: 张复实 Email: zhangfs@mail.tsinghua.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 田宏健,周庆复,沈淑引,许慧君.酞菁-卟啉超分子的形成及光致电子转移过程[J]. 物理化学学报, 1996,12(01): 44-48
2. 陈建新,田宏健,张红灏,周庆复,许慧君,徐广智.卟啉酞菁模型化合物光致电子转移研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(01): 12-17
3. 王宝辉,王德军,曹云伟,张杰,李铁津.酞菁铜与Q-CdS超微粒子界面的光致电荷转移研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 177-180
4. 刘剑波,赵瑜,张富实,赵福群,唐应武,宋心琦,姚光庆.磺化酞菁在甲醇-水溶液中的二聚作用研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 163-168
5. 袁庆华,王朝晖,朱起鹤,孔繁毅.四苯基卟啉等分子的超快弛豫过程研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 193-195
6. 刘剑波,赵瑜,赵福群,张复实,唐应武,宋心琦,周福添.质子化和脱质子化对酞菁光谱的影响[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 202-207
7. 李华明;叶兴凯;吴越.FePc结构对Pd(OAc)₂/HQ/FePc催化环己烯氧化活性的影响 [J]. 物理化学学报, 2001,17(05): 432-437
8. 黄剑东;刘尔生;杨素苓;欧阳瑞珍;陈耐生;黄金陵;黄自强;孙建成;许建华.不同激发波长下ZnPcSP的光敏化能力和抗癌活性[J]. 物理化学学报, 1997,13(03): 247-251
9. 林梅金;王俊东;陈耐生;黄金陵.溶剂中微量水对取代酞菁锌吸收光谱的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 677-680
10. 吕功勋;李树本;Savinov E N;Parmon V N.酞菁钴界面修饰的Cu_xS CdS复合硫化物光催化剂[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 790-795
11. 张伟德;詹瑞云;叶兴凯;吴越.硅胶键联MPc的制备及其在氧活化中的作用[J]. 物理化学学报, 1994,10(07): 654-657
12. 袁婕;张兴堂;蒋晓红;李蕴才;黄亚彬;杜祖亮.酞菁铜化合物LB膜的制备及结构形态研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 983-987
13. 刘巍;叶涛;郭荣.CTAB对四磺酸基酞菁钴与Na₂S反应的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 763-768
14. 周淑琴;邓晓东.酞菁复合膜的组装技术及光电子过程表征[J]. 物理化学学报, 1997,13(06): 560-563
15. 陈德文,王海,周建威,杨玉昆,徐广智.双吡啶盐/酞菁体系的光诱导电子转移的ESR研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 325-330
16. 周淑琴,余建二,金祥凤,王庆广.高分辨双晶XRF研究酞菁化合物中硫杂质的化学态[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 447-449
17. 李博;鲍超;施柏焯;川上友则;平松光夫.两种晶型酞菁氧钒纳米颗粒的制备及形成机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1057-1061
18. 王芳;吴锋;杨凯.酞菁类化合物对MH/Ni电池性能的影响[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 854-857

扩展功能

本文信息

PDF(1214KB)

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

▶ 酞菁

▶ 密度泛函方法(DFT)

▶ 含时密度泛函方法(TDDFT)

▶ 基态

▶ 激发态

本文作者相关文章

▶ 宋争林

▶ 张复实

▶ 陈锡侨

▶ 赵福群

19. 张俊颖;吴敏;秦艳涛;陈蕊;蒋银花;孙岳明;杨朝晖.交流阻抗法研究四羧基酞菁锌掺杂的二氧化钛半导体电极[J].物理化学学报,2008,24(01):79-84
20. 郭福春;陈德文;徐广智.金属酞菁与咪唑类配体的轴向配位反应热力学[J].物理化学学报,1997,13(09):838-842
21. 丁曰/山明;袁迅道;张引;席时权.酞菁铜掺杂SnO₂超微粒子复合膜的研究[J].物理化学学报,1997,13(05):413-416
22. 冯海霞;朱志昂;王传忠;阮文娟;李瑛;陈荣梯.钴(II)酞菁与巯基乙醇轴向配位反应的动力学[J].物理化学学报,1999,15(02):167-172
23. 刘恺;沈淑引;许慧君.酞菁与TiO₂微粒间的光诱导电子转移相互作用[J].物理化学学报,2000,16(12):1103-1109
24. 刘海超;杨锡尧;冉国册;闵恩泽.负载离子对型酞菁钴双功能硫醇氧化催化剂[J].物理化学学报,1999,15(10):918-924
25. 李希友;陈艳丽;许慧君.单冠醚取代酞菁形成的络合物中的荧光猝灭[J].物理化学学报,1999,15(06):512-516
26. 黄金陵;黄剑东;刘尔生;陈耐生.酞菁配合物的结构与其光动力抗癌活性[J].物理化学学报,2001,17(07):662-671
27. 方亮;龚荣洲;官建国;袁润章.酞菁钴/纳米铁复合颗粒的结构与微波电磁特性[J].物理化学学报,2001,17(04):364-366
28. 刘剑波;赵福群;赵瑜;张复实;唐应武;宋心琦;周福添.空心酞菁光物理性质的取代基效应[J].物理化学学报,1996,12(06):491-495
29. 王蕾;刘杰;冯绪胜;杨孔章;吴星;姚荣.卟啉、酞菁L-B膜中取代基的定向作用研究[J].物理化学学报,1993,9(04):466-472
30. 周宇清;乔铁成;王新平;陈文启;席时权;赵永年;崔启良;李冬姝;邹广田.酞菁化合物LB单分子膜的SERRS[J].物理化学学报,1992,8(03):398-400
31. 韩明勇;刘旺;王德军;肖良质;李铁津.酞菁锰与表面吸附的NO₂之间的电荷转移相互作用研究[J].物理化学学报,1991,7(03):349-353
32. 黄斯娉;袁中直.双核钴锰酞菁对SOCl₂还原反应的电催化性能[J].物理化学学报,2009,25(08):1599-1604
33. 陈日耀,陈震,郑曦,陈晓,黄彩霞.CoPc(COOH)₈-SA/mCS双极膜的制备及表征[J].物理化学学报,2009,25(12):2438-2444