

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 论文

### 大环炔基噻吩衍生物的结构和UV-Vis光谱的理论研究

黄双, 任爱民, 李卓, 赵杨, 闵春刚

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

#### 摘要:

用DFT 和TDDFT方法对大环炔基噻吩衍生物的结构和UV-Vis光谱进行了理论研究. 对分子不同的对称性结构( $C_{1v}$ ,  $C_5$ ,  $C_{5v}$ )进行了优化, 得到了稳定的几何构型. 以优化构型为基础计算了分子的UV-Vis光谱, 结果表明,  $C_5$ ,  $C_{5v}$ 对称性下丁基取代的分子构型(C[3T\_DA]<sub>5</sub>-Bu)都是较稳定的; 当分子构型具有 $C_5$ 对称性时, 得到的光谱数据与实验值符合的较好. 对于大环噻吩C[3T\_DA]<sub>5</sub>衍生物, 性质相同取代基的体积大小及分子对称性都将影响结构的稳定性.

关键词: 含时密度泛函理论; 对称性; 紫外可见光谱

### Theoretical Study on Structures and UV-Vis Spectra of Macrocyclic Thiophene Derivatives

HUANG Shuang, REN Ai-Min\*, LI Zhuo, ZHAO Yang, MIN Chun-Gang

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, China

#### Abstract:

The theoretical studies on macrocyclic thiophene derivatives(C[3T\_DA]<sub>5</sub>) in different symmetries( $C_{1v}$ ,  $C_5$ ,  $C_{5v}$ ) were carried out with density functional theory(DFT) and Time-depended density functional theory(TDDFT) methods. The stable molecular structures were obtained by DFT. And then the UV-Vis spectra of C[3T\_DA]<sub>5</sub> derivatives were calculated base on the optimized structures. The results show that C[3T\_DA]<sub>5</sub>-Bu with  $C_5$  and  $C_{5v}$  symmetries are more stable. The calculated spectra of C[3T\_DA]<sub>5</sub>-Bu with  $C_5$  is in well agreement with the experimental values. For macrocyclic thiophene(C[3T\_DA]<sub>5</sub>) derivatives, both molecular symmetry and the substituent with the same property influence the stability of the molecular structure.

Keywords: Time-depended density functional theory; Symmetry; UV-Vis spectrum

收稿日期 2009-07-07 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20673045, 20973078)、留学回国人员启动基金[外交司留(2008)890号]、国家“九七三”计划项目(批准号: 2002CBN613406)和吉林大学超分子结构与材料国家重点实验室开放课题(批准号: SKLSSM200716)资助.

通讯作者: 任爱民, 女, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事量子化学计算研究. E-mail: aimin\_ren@yahoo.com

作者简介:

#### 参考文献:

- [1]Denk W., Strickler J. H., Webb W. W.. Science[J], 1990, 248: 73—76
- [2]Dvornikov A. S., Rentzepis P. M.. Opt. Commun.[J], 1995, 119(3): 341—346
- [3]Kanis D. R., Ratner M. A., Marks T. J.. Chem. Rev.[J], 1994, 94(1): 195—242
- [4]Cumpston B. H., Ananthavel S. P., Barlow S., et al.. Nature[J], 1999, 398(6722): 51—54
- [5]Denk W., Svoboda K.. Neuron.[J], 1997, 18(3): 351—357
- [6]Allain C., Schmidt F., Lartia R., et al.. Chem. Biochem.[J], 2007, 8: 424—431
- [7]Fleitz P. A., Brant M. C., Sutherland R. L., et al.. SPIE Proc.[J], 1998, 91: 3472—3480

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(479KB)

[HTML全文]

[\({article.html\\_WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

本文关键词相关文章

含时密度泛函理论; 对称性; 紫外可见光谱

本文作者相关文章

PubMed

- [8] Ehrlich J. E., Wu X. L., Lee I. Y. S., et al.. Opt. Lett.[J], 1997, 22: 1843—1845
- [9] Kim O. K., Fort A., Barzoukas M., et al.. J.Mater. Chem.[J], 1999, 9(9): 2227—2232
- [10] Wuerthner F., Effenberger F., Wortmann R., et al.. Chem. Phys.[J], 1993, 173(2): 305—314
- [11] Albota M., eljonne D., Bredas J. L., et al.. Science[J], 1998, 281(5383): 1653—1656
- [12] Rumi M., Ehrlich J. E., Heikal A. A., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2000, 122(39): 9500—9510
- [13] ZHAO Yang(赵杨), REN Ai-Min(任爱民), ZHANG Xiang-Biao(张祥标), et al.. Acta Chim. Sinica(化学学报)[J], 2008, 66(1): 15—22
- [14] ZHOU Shu-Lan(周树兰), ZHAO Xian(赵显), SUN Xue-Qin(孙学勤), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(10): 1949—1952
- [15] Mariusz B., Peter R., Elena M. O.. J. Luminescence[J], 2004, 110(4): 225—231
- [16] Iyoda M.. Heteroatom Chemistry[J], 2007, 18(5): 460—466
- [17] Fabian J., Hartmann H.. J. Phys. Org. Chem.[J], 2007, 20(8): 554—567
- [18] Giroto C., Cheyns D., Aernouts T., et al.. Organic Electronics[J], 2008, 9(5): 740—746
- [19] Demadrille R., Zagorska M., Billon M., et al.. J. Solid State Electrochem.[J], 2007, 11(8): 1051—1058
- [20] Michele W. H., Ajit B., Guda R., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2008, 130(11): 3252—3253
- [21] Nakao K., Nishimura M., Tamachi T., et al.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2006, 128(51): 16740—16747
- [22] Bhaskar A., Ramakrishna G., Hagedorn K., et al.. J. Phys. Chem. B[J], 2007, 111(5): 946—954
- [23] Fuhrmann G., Debaerdemaeker T., Buerle P.. Chem. Commun.[J], 2003, 8: 948—949
- [24] Kromer J., Rios-carreras I., Fuhrmann G., et al.. Angew. Chem. Int. Ed.[J], 2000, 39(19): 3481—3486
- [25] Zein S., Delbecq F., Simonb D.. Phys. Chem. Chem. Phys.[J], 2009, 11(4): 694—702

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 6856