

研究论文

C60-多吡啶Ru(II)配合物电子光谱的密度泛函理论研究

阚玉和* 李 强

(淮阴师范学院化学系 江苏省低维材料化学重点建设实验室 淮安 223300)

收稿日期 2008-4-14 修回日期 2008-6-25 网络版发布日期 2008-12-14 接受日期 2008-9-6

摘要

应用密度泛函理论(DFT)方法对两种C60-多吡啶Ru(II)衍生物进行理论研究. 在TZP全电子基组优化构型基础上, 通过分析前线轨道组成, 探讨金属及配体对C60母体影响; 以LB及SAOP校正局域密度近似, 用含时密度泛函(TDDFT)方法, 考虑溶剂化效应, 计算化合物1和2的电子吸收光谱. 结果表明, 化合物1和2在气相与丙酮溶液中所对应的光谱值差异较为明显, 溶剂化效应使吸收光谱蓝移. 计算得到化合物1和2在丙酮溶液中电子光谱与实验值吻合较好, 低能跃迁多为金属参与的混合跃迁, 高能跃迁主要由C60与配体部分贡献.

关键词

[富勒烯](#) [多吡啶钌](#) [含时密度泛函](#) [电子吸收光谱](#) [电荷转移](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

阚玉和 yhkan@yahoo.cn

作者个人主页:

阚玉和* 李 强

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(333KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含 “](#)

[富勒烯” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [阚玉和,李强](#)