

碳、氮和氧族元素取代对2,1,3-苯并噻二唑衍生物的电子、光谱、电荷传输性质影响的理论研究

Carbon, Nitrogen, and Chalcogen Substitution Effects on 2,1,3-Benzothiadiazole Derivative: Theoretical Investigations of Electronic, Optical, and Charge Transport Properties

摘要点击 118 全文点击 50 投稿时间: 2011-9-8 采用时间: 2011-10-17

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/25/01/25-30

中文关键词 [有机电致发光](#) [2,1,3-苯并噻二唑](#) [电子性质](#) [光谱性质](#) [重组能](#)

英文关键词 [Organic light-emitting diode](#) [2,1,3-benzothiadiazole](#) [Electronic property](#) [Optical property](#) [Reorganization energy](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
胡波*	吉林师范大学化学学院, 四平136000; 吉林师范大学环境友好材料制备与应用省部共建教育部重点实验室, 四平136000	hubo97@yahoo.cn
姚婵	吉林师范大学化学学院, 四平136000; 吉林师范大学环境友好材料制备与应用省部共建教育部重点实验室, 四平136000	
王庆伟	吉林师范大学化学学院, 四平136000; 吉林师范大学环境友好材料制备与应用省部共建教育部重点实验室, 四平136000	
张浩	吉林大学理论化学计算国家重点实验室, 长春130023	
于健康	吉林大学理论化学计算国家重点实验室, 长春130023; 辽宁工程技术大学基础教学部应用物理与技术实验室, 葫芦岛123000	

中文摘要

采用量子化学方法设计并研究了一系列CH₂、NH、O和Se取代的2,1,3-苯并噻二唑衍生物的电子性质、光谱性质和电荷传输性质。采用的研究方法是从头算Hartree-Fock和密度泛函方法。研究表明,中心芳环的S原子分别被CH₂、NH、O和Se取代后,母体分子的电子性质、光谱性质以及电荷传输性质得到了很好的调节。根据得到的理论研究结果,在2,1,3-苯并噻二唑衍生物基础上进行结构修饰得到的一系列分子可以作为有机发光二极管中的有机发光材料。

英文摘要

A series of CH₂, NH, O, and Se substituted 2,1,3-benzothiadiazole derivatives have been de-signed and investigated computationally to elucidate their potential as organic light-emitting materials for organic light-emitting diodes. Both ab initio Hartree-Fock and hybrid density functional methods are used. It is found that adjusting the central aromatic ring by replacing S by CH₂, NH, O, and Se makes it possible to fine-tune the electronic, optical, and charge transport properties of the pristine molecule.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计