

基于激发态分子内质子转移过程的 HBT-OMe 分子检测 HClO 的荧光增强机理*

刘晓军^{1)†} 杨雪²⁾

1) (齐齐哈尔大学理学院, 齐齐哈尔 161006)

2) (吉林化工学院理学院, 吉林 132022)

(2022 年 12 月 5 日收到; 2023 年 3 月 25 日收到修改稿)

采用密度泛函理论 (DFT) 和含时密度泛函理论 (TDDFT) 方法, 基于连续介质模型, 对 HBT-OMe 分子及其与 HClO 反应的产物基态和激发态结构及电荷分布等性质进行研究, 优化构型结果表明, HBT-OMe 分子不能发生质子转移过程而其产物分子则能发生. 红外振动光谱与分子共价作用分析进一步证实产物分子能发生质子转移过程. 计算的前线分子轨道结果表明: HBT-OMe 分子存在扭曲电荷转移 (TICT) 过程, 最高已占据分子轨道 (HOMO) 和最低未占据分子轨道 (LUMO) 电荷密度重叠小导致 HBT-OMe 分子荧光强度弱, 结合产物分子势能曲线发现, 产物分子质子转移过程能抑制分子的 TICT 过程, 从而使其荧光强度增强.

关键词: 激发态质子转移, 含时密度泛函, 次氯酸**PACS:** 31.10.+z, 31.15.A-, 82.39.Jn, 31.15.ee, 87.15.ht**DOI:** 10.7498/aps.72.20222313

1 引言

激发态分子内质子转移过程 (ESIPT) 是一种非常重要的光物理过程^[1-5]. 1956 年, Weller^[6] 首次观察到 MS (methyl salicylate) 分子体系的双荧光现象, 进而将双荧光现象归因于激发态 M⁺ESIPT 的发生, 并提出 ESIPT 过程导致 MS 分子构型异构化的机制.

由于 ESIPT 分子普遍具有光稳定性好, 双荧光以及大的 Stokes 位移等性质, 基于 ESIPT 反应的功能性分子已被广泛应用在荧光探针、生物成像、发光材料等领域^[7-9]. 近些年将具有 ESIPT 性质分子用于次氯酸 (HClO) 的检测越来越引起关注. HClO 是一种重要的生物活性氧 (ROS), 在许多生物化学过程中起着重要的作用^[10-12]. 水

体中残留的 HClO 会引起一些环境的污染, 造成生物疾病问题, 对地球生态环境的安全和人类身体健康造成很大的危害, 基于其重要性, 对 HClO 的研究在国内外引起了广泛关注. 检测水体和生命体系中的 HClO 已成为一个重要的课题, 发展设计具有快速、灵敏、高选择性的探针分子从而检测环境样品和生物体系中 HClO 具有重要的意义和应用价值^[13,14]. He 等^[15] 设计合成基于 ESIPT 的荧光探针分子, 实现对 HClO 的快速检测; Pan 等^[16] 设计具有 ESIPT 性质的检测 HClO 荧光分子, 其具有灵敏度高检出限低等特点. Wu 等^[17] 设计基于 ESIPT 的 HBT-OMe 探针分子, 由于其甲氧基羟基苯并噻唑可以探测 HClO. 研究表明, HBT-OMe 分子可以敏感探测 HClO, 并且随着 HClO 增加, 体系荧光强度逐渐增大. 但迄今为止, 其微观机制还不清楚.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11904126) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xiaojunliuqhr@163.com

本文采用密度泛函和含时密度泛函理论系统研究了 HBT-OMe 及其产物分子结构和电荷分布以及势能曲线等信息, 揭示了 HBT-OMe 体系荧光强度低, 及随着 HClO 增加荧光强度逐渐增强的原因.

2 研究方法

利用密度泛函理论 (DFT)^[18–20] 和含时密度泛函理论 (TD-DFT)^[21–24] 方法, B3 LYP 泛函^[25,26] 和 tzvp 基组^[27,28] 分别优化获得了 HBT-OMe 及其产物分子的基态 (S_0) 和第一激发态 (S_1) 的几何构型. 基于此结构, 计算得到了 HBT-OMe 分子、产物分子的 Enol 和 Keto 形式下基态 (S_0) 和第一激发态 (S_1) 的几何构型在 S_0 态和 S_1 态的键长、键角、前线分子轨道等信息以及产物分子的红外 (IR) 振动光谱、势能曲线. 为了更好地描述实验结果, 选用环己烷作为溶剂, 并采用自洽反应场 (SCRF) 理论中的连续介质模型 (IEFPCM) 来计算溶剂效应^[29,30]. 此外, 以 0.1 Å 的步长逐步延长 O_1-H_2 的键长扫描得到了产物在 S_0 态和 S_1 态的势能曲线, 来直观地反映化合物的质子转移过程. 本文所有的计算工作均利用 Gaussian 程序完成^[31].

3 结果与讨论

3.1 分子基态和激发态的几何结构

计算优化的 HBT-OMe 分子在基态和第一激发态的几何构型详见图 1. 图 1 表明相比于基态, 激发态 HBT-OMe 分子的苯环更倾向于平面结构. 表 1 列出了重要的 HBT-OMe 在不同电子态的键长和键角参数信息. 在 S_0 态, $N_1-C_2-C_3-C_4$ 角度为 26.247°, 当光激发 HBT-OMe 至 S_1 态时其角度减小至 3.223°. 在加入 HOCl 后, HBT-OMe 产物分子更倾向于平面结构, 其基态 O_1-H_2 和 $H_2\cdots N_3$ 的键长分别为 0.990 Å 和 1.739 Å. 当光激发产物分子至 S_1 态时, 这些键长分别变为 1.076 Å 和 1.482 Å. 通过对键长比较, 可发现相比于 S_0 态而言, O_1-H_2 的键长在 S_1 态上有所增大, 而 $H_2\cdots N_3$ 的键长在 S_1 态则表现为缩短, 该结果表明产物分子在激发态有发生质子转移的趋势.

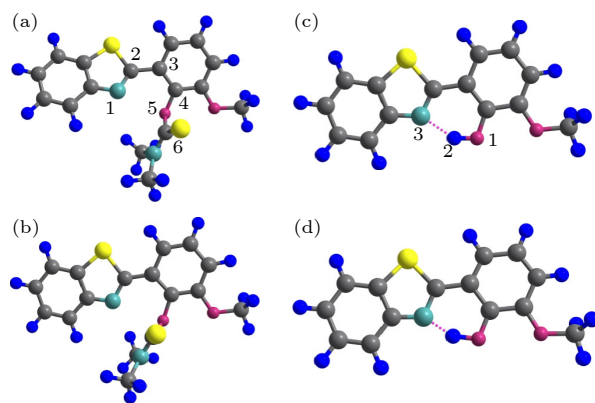


图 1 优化的 HBT-OMe-OMe 几何构型 (a) S_0 态; (b) S_1 态. 产物分子几何构型 (c) S_0 态; (d) S_1 态. 其中粉色为氧原子, 绿色为氮原子, 黄色为硫原子

Fig. 1. Optimized structures of HBT-OMe: (a) S_0 ; (b) S_1 . Product molecule: (c) S_0 ; (d) S_1 . O atom: pink; N atom: green; S atom: yellow.

表 1 HBT-OMe-OMe 重要的二面角信息
Table 1. Dihedral angle information of HBT-OMe.

	反应物	
	$N_1-C_2-C_3-C_4$	$C_3-C_4-O_5-C_6$
S_0	26.247	3.223
S_1	-101.690	-76.981
	产物	
	$N_1-C_2-C_3-C_4$	$C_3-C_4-O_5-H_6$
S_0	-0.005	-0.004
S_1	0.028	-0.011

3.2 垂直激发能与相应的振子强度计算

经过 B3 LYP 泛函/tzvp 的计算, 获得了 HBT-OMe 分子的垂直激发能, 研究发现其吸收峰位置位于 297 nm, 而其产物吸收峰位于 340 nm. 在较低激发态下的垂直激发能与相应的振子强度以及分子轨道的跃迁贡献列入表 2 中. 从表 2 可以看出, HBT-OMe 的 S_1 态对应的振子强度最大, 跃迁贡献的 98.8% 来源于 HOMO 到 LUMO 的跃迁, 理论计算表明吸收最大值应该位于 S_1 态.

表 2 HBT-OMe 的垂直激发能
Table 2. Vertical excitation energy of HBT-OMe.

	Electronic excitation energy/nm	Oscillator strengths	Orbital transition
反应物			
S_1	392.86	0.0082	H → L (98.8%)
S_2	367.89	0.0003	H-1 → L (99.1%)
产物			
S_1	357.49	0.1228	H → L (96.9%)
S_2	307.23	0.4634	H-2 → L (4.3%) H-1 → L (91.9%)

前线分子轨道有助于了解分子激发态跃迁时电荷分布变化情况^[32-34]. 由表 2 可以看出, S_1 态对应于 HBT-OMe 分子及其产物的最高占据轨道 (HOMO) 和最低未占据轨道 (LUMO) 的分子轨道跃迁. 因此, 图 2(a), (b) 展示了 HBT-OMe 分子的最高占据轨道 (HOMO) 和最低未占据轨道 (LUMO) 的电子密度分布和能级. 由图 2 可以发现, 分子的 HOMO 和 LUMO 轨道分别具有 π 和 π^* 特征. 值得注意的是, 对于 HBT-OMe 分子, 电子密度主要集中在氨基上, 而当电子从 HOMO 轨道跃迁到 LUMO 轨道, 相应的电子密度则主要布居在苯环上, 表明分子存在扭曲电荷转移过程 (TICT). 也就是说, 电荷从氨基向苯环转移, 同时两个基团之间的 C=C 双键扭曲, 是 TICT 态形成的根本原因. HBT-OMe 分子的扭曲的 TICT 态, 其结构与电荷布局分布与 S_0 态有很大差异性, 分子的荧光的强度与电荷密度重叠程度直接相关, 因此 HBT-OMe 分子 HOMO 和 LUMO 电荷密度重叠小就导致实验中观测到的 HBT-OMe 分子荧光强度弱. 在向 HBT-OMe 分子添加 HClO 后, 相比于 HBT-OMe 分子, 其产物分子结构倾向于平面结构, HOMO 和 LUMO 轨道具有更大的重叠程度, 如图 2(c), (d) 所示. 因此导致该产物分子相比于 HBT-OMe 分子具有更强的荧光. 同时, 相比于 HBT-OMe 分子而言, 产物分子 O_1 原子上的电子密度在减小, 而 N_3 原子上的电子密度分布在增多, 该现象表明在光激发的作用下产物分子发生了分子内的电荷转移. N_3 原子上电子密度分布的增多可以增强其对质子的吸引能力. 由垂直激发能计算结果可知, 对于 HBT-OMe 分子而言, 其第一电

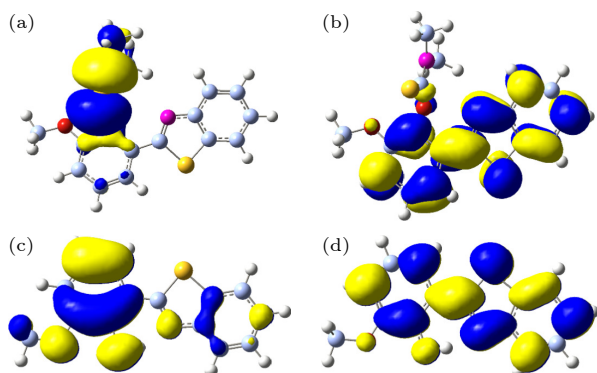


图 2 HBT-OMe 的前线分子轨道 (a) HOMO; (b) LUMO. 产物分子的前线分子轨道 (c) HOMO; (d) LUMO

Fig. 2. The frontier molecular orbital of HBT-OMe: (a) HOMO; (b) LUMO. Product molecule: (c) HOMO; (d) LUMO.

子激发态与基态间能级差比较大, 而内转换过程不是影响其荧光强度的主要因素.

3.3 红外振动光谱

分子红外振动光谱是研究激发态 ES IPT 的有效手段^[35,36]. 为了获得更多关于 S_0 和 S_1 态的 ES IPT 的信息, 通过计算 HBT-OMe 产物分子的 S_0 和 S_1 态红外振动光谱, 计算得到的 HBT-OMe 产物分子在基态和激发态的红外光谱, 如图 3 所示, 其光谱的范围为从 1800—3400 cm^{-1} . 计算结果在 GaussView 中可以明显看到特征峰的振动. 对于 S_0 态的 HBT-OMe 分子, 特征峰的峰值位置大约在 3260 cm^{-1} 位置处, 源于 O—H 基团的伸缩振动. 当 HBT-OMe 产物分子被激发至 S_1 态时, O_1 —H 基团振动特征峰的位置为 1974 cm^{-1} , 1286 cm^{-1} 处展现出明显的红移特征. 这一结果表明相比于基态而言, HBT-OMe 产物分子的氢键 (O_1 —H...N) 在 S_1 态有所增强, 同时也进一步表明了 HBT-OMe 产物分子能发生 ES IPT 过程.

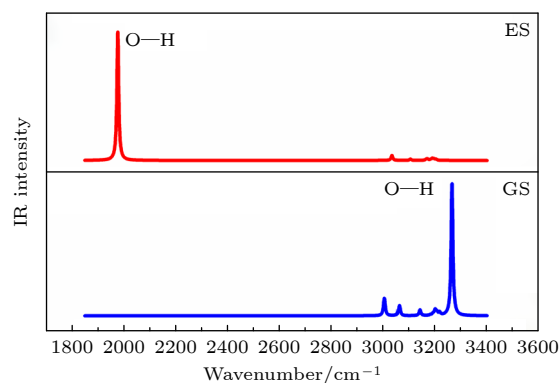


图 3 产物分子的 IR 振动光谱

Fig. 3. The infrared vibrational spectrum of product molecule..

3.4 分子共价相互作用分析

为了进一步研究分子间的非共价键产生的相互作用, 研究了 3 种包合物中的非共价键产生的相互作用. Johnson 等^[37,38] 提出的约化密度梯度 (RDG) 方法已被证明是研究分子内或分子间非共价相互作用的非常有力的方法, 其可以用来分析分子内或分子间的氢键特性. RDG 函数表达式为

$$\text{RDG}(r) = \frac{1}{2(3\pi^2)^{1/3}} \frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)^{4/3}}. \quad (1)$$

Hessian 矩阵的第二大特征值 λ_2 和总电子密度 ($\rho(r)$) 的表达式为

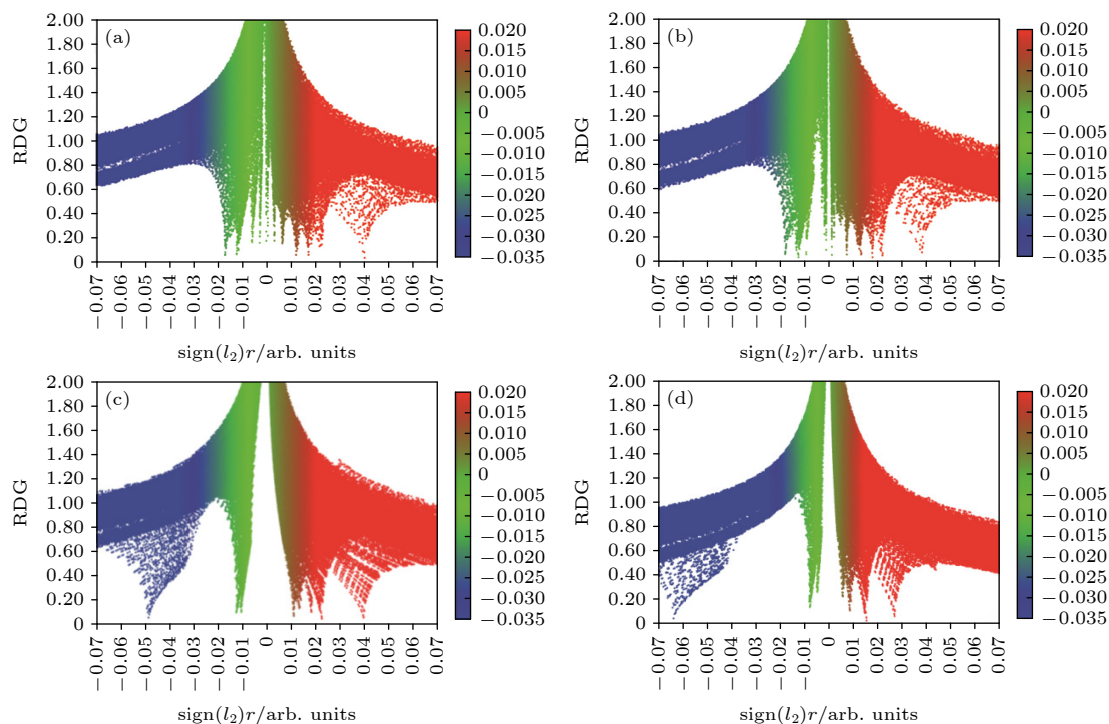


图 4 HBT-OMe 分子及产物分子在 S_0 态 ((a), (c)), S_1 态 ((b), (d)) 的非共价相互作用图

Fig. 4. The RDG and scatter diagram of HBT-OMe and product molecule in S_0 ((a), (c)) and S_1 ((b), (d)).

$$\Omega(r) = \text{sign}(\lambda_2(r))\rho(r). \quad (2)$$

当 $\Omega(r)$ 为负值时, 意味着其为相互吸引作用, 如氢键相互作用; 当 $\Omega(r)$ 为正值时, 意味着存在相互排斥作用, 如空间斥力相互作用; $\Omega(r)$ 为 0 时表示范德瓦耳斯相互作用. RDG 图由 Multiwfn 3.3.7 软件结合 VMD 1.9.3 程序绘制 [39,40]. 图 4 所示为 HBT-OMe 及其产物分子的 $\Omega(r)$ 和 RDG 函数之间的关系. HBT-OMe 基态及激发态中分子的峰值均为 -0.02 , 峰位几乎相同, 说明 HBT-OMe 的分子内相互作用基本不变; HBT-OMe 产物分子基态和激发态的峰值位置分别为 -0.05 和 -0.09 . 非共价相互作用产生的结果说明 HBT-OMe 产物分子自 S_0 态至 S_1 态, 分子内 O—H 键的相互作用减弱, N—H 键的相互作用增强. 该结论进一步证实之前关于分子内相关键长的结果.

3.5 分子的势能曲线

势能曲线 (PEC) 可以很好地揭示分子基态或激发态质子发生转移的难易程度, 对于分析 ES IPT 过程的机理非常重要 [41–43]. 为了更进一步探索 HBT-OMe 产物分子的 ES IPT 机理, 将 O_1-H_2 键长固定设置在一系列的数值上, 其间隔为 0.1 \AA , 逐一计算获得了 HBT-OMe 产物分子基态与激发态的势能曲线, 如图 5 所示, 势能曲线上每个点都

经过了优化. 从图 5 可以看出, 针对 HBT-OMe 产物分子的 S_0 的势能曲线, 其基态发生质子转移的能垒的高度达到 9.18 kcal/mol , 因此在基态时很难越过该能垒获得稳定的基态 keto 构型, 基态不能发生质子转移过程. 但是对于 HBT-OMe 产物分子构型 S_1 态的势能曲线, 该势能曲线势垒则降至 0.021 kcal/mol , 表明其 ES IPT 过程非常容易发生, 该过程发生有助于限制 TICT 过程的发生.

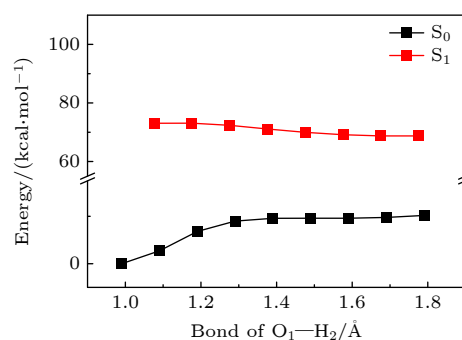


图 5 产物的势能曲线

Fig. 5. The potential energy curve of product molecule.

4 结论

基于密度泛函理论, 采用 B3LYP 泛函在 tzvp 基组上计算了水中 HBT-OMe 及其与 HClO

反应的产物分子基态与激发态结构及电荷分布信息. 发现 HBT-OMe 分子不能发生 ESIPT 过程, 而其产物分子则能够发生 ESIPT 过程. 计算的激发态结构结果表明 HBT-OMe 不是平面结构, 存在着 TICT 过程, 其 HOMO 和 LUMO 电荷密度重叠小导致 HBT-OMe 分子荧光强度弱. 当加入 HClO 后, 其产物分子结构相比于 HBT-OMe 分子更倾向于平面结构, 产物分子势能曲线扫描结果说明产物分子发生的 ESIPT 过程, 产物分子的 HOMO 和 LUMO 电荷密度有更大的重叠程度导致产物分子荧光强度变强. 本工作揭示 HBT-OMe 分子及加入 HClO 后荧光强度变化的微观机制, 为设计合成基于 ESIPT 分子的 HClO 荧光探针提供重要的参考信息与借鉴.

参考文献

- [1] Chen K Y, Cheng Y M, Lai C H, Hsu C C, Ho M L, Lee G H, Chou P T 2007 *J. Am. Chem. Soc.* **129** 4534
- [2] Coe J D, Martinez T J 2005 *J. Am. Chem. Soc.* **127** 4560
- [3] English D S, Zhang W, Kraus G A, Petrich J W 1997 *J. Am. Chem. Soc.* **119** 2980
- [4] Fischer M, Wan P 1998 *J. Am. Chem. Soc.* **120** 2680
- [5] Fischer M, Wan P 1999 *J. Am. Chem. Soc.* **121** 4555
- [6] Weller A 1956 *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie* **60** 1144
- [7] Keck J, Kramer H E A, Port H, Hirsch T, Fischer P, Rytz G 1996 *J. Phys. Chem.* **100** 14468
- [8] Demchenko A, Klymchenko A, Pivovarenko V, Ercelen S, Duportail G, Mely Y 2003 *J. Fluoresc.* **13** 291
- [9] Park S, Kwon J E, Kim S H, Seo J, Chung K, Park S Y, Jang D J, Medina B M, Gierschner J 2009 *J. Am. Chem. Soc.* **131** 14043
- [10] Han J, Li Y Y, Wang Y, Bao X, Wang L, Ren L, Ni L, Li C 2018 *Sens. Actuators B* **273** 778
- [11] Wu S M, Pizzo S V 2001 *Arch. Biochem. Biophys.* **391** 119
- [12] Khatib S, Musa R, Vaya J 2007 *Bioorg. Med. Chem.* **15** 3661
- [13] Mao L C, Liu Y Z, Yang S J, Li Y X, Zhang X Y, Wei Y 2019 *Dyes Pigments* **162** 611
- [14] Dickinson B C, Chang C J 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 11561
- [15] He Y H, Xu Y, Shang Y T, Zheng S W, Chen W H, Pang Y 2018 *Anal. Bioanal. Chem.* **410** 7007
- [16] Pan Y M, Huang J, Han Y F 2017 *Tetrahedron Lett.* **58** 1301
- [17] Wu L L, Yang Q Y, Liu L Y, Sedgwick A C, Cresswell A J, Bull S D, Huang C S, James T D 2018 *Chem. Commun.* **54** 8522
- [18] Becke A D 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 5648
- [19] Zhu L X, Zhou Q, Cao B F, Li B, Wang Z R, Zhang X L, Yin H, Shi Y 2022 *J. Mol. Liq.* **347** 118365
- [20] Arshad M N, Khalid M, Asad M, Braga A A C, Asiri A M, Alotaibi M M 2022 *ACS. Omega.* **7** 11631
- [21] Yang D P, Yang G, Zhao J F, Zheng R, Wang Y S 2017 *RSC Adv.* **7** 1299
- [22] Yang D P, Zhao J F, Zheng R, Wang Y S, Lyu J 2015 *Spectrochim. Acta A* **151** 368
- [23] Zhao J F, Dong H, Yang H, Zheng Y J 2018 *Org. Chem. Front.* **5** 2710
- [24] Zadeh S S, Ebrahimi A, Shahraki A 2023 *Spectrochim. Acta Part A* **292** 122453
- [25] Song P, Li Y Z, Ma F C, Pullerits T, Sun M T 2013 *J. Phys. Chem. C* **117** 15879
- [26] Zhou Q, Du C, Yang L, Zhao M Y, Dai Y M, Song P 2017 *J. Phys. Chem. A* **121** 4645
- [27] Han J H, Liu X C, Li H, Yin H, Zhao H F, Ma L N, Song Y D, Y Shi 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 26259
- [28] Zutterman F, Liégeois V, Champagne B 2022 *J. Phys. Chem. B* **126** 3414
- [29] Cammi R, Tomasi J 1995 *J. Comput. Chem.* **16** 1449
- [30] Mennucci B, Cancès E, Tomasi J 1997 *J. Phys. Chem. B* **101** 10506
- [31] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 09, Gaussian, Inc, Wallingford, CT, USA, 2009
- [32] Wang Y, Shi Y, Cong L, Li H 2015 *Spectrochim. Acta A* **137** 913
- [33] Zhao G J, Han K L 2007 *J. Phys. Chem. A* **111** 9218
- [34] Zhao G J, Han K L 2007 *J. Phys. Chem. A* **111** 2469
- [35] Yang Y G, Liu Y F, Yang D P, Li H, Jiang K, Sun J F 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 32132
- [36] Yang Y J, Liu Y F, Yang D P, Li H, Jiang K, Sun J F 2015 *Spectrochim. Acta Part A* **151** 814
- [37] Johnson E R, Keinan S, Mori-Sanchez P, Contreras-García J, Cohen A J, Yang W 2010 *J. Am. Chem. Soc.* **132** 6498
- [38] Liu S L, Zhao Y S, Zhang C P, Lin L Q, Li Y X, Song Y F 2019 *Spectrochim. Acta, Part A* **219** 164
- [39] Lu T, Chen F W 2012 *J. Comp. Chem.* **33** 580
- [40] Humphery W, Dalke A, Schulten K 1996 *J. Mol. Graph* **14** 33
- [41] Sobolewski A L, Domcke W 1999 *J. Phys. Chem. A* **103** 4494
- [42] Sobolewski A L, Domcke W 1999 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1** 3065
- [43] Li C Z, Ma C, Li D L, Liu Y F 2016 *J. Lumin.* **172** 29

Mechanism of fluorescence enhancement of HClO detected by excited-state intramolecular proton transfer based HBT-OMe molecule*

Liu Xiao-Jun^{1)†} Yang Xue²⁾

1) (*College of Science, Qiqihar University, Qiqihar 161006, China*)

2) (*College of Science, Jilin Institute of Chemical Technology, Jilin 132022, China*)

(Received 5 December 2022; revised manuscript received 25 March 2023)

Abstract

The molecule with excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) has wide applications in fluorescent probe, biology imaging, light-emitting materials, etc. Biologically active oxygen hypochlorite (HClO) exists widely in the biological and chemical environment, which can pose a great threat to human health. Design of HClO-sensitive molecules in solvents is very important. Recently, Wu et al. [Wu L L, Yang Q Y, Liu L Y, et al. 2018 *Chem. Commun.* **54** 8522] designed an ESIPT-based HBT-OMe probe molecule, which can detect HClO due to its methoxy-hydroxy-benzothiazole. They found that the fluorescence intensity of the system gradually increases with HClO increasing. However, the microscopic mechanism of this highly efficient fluorescent probe is not well understood. Therefore, in this work, we theoretically investigate the ESIPT mechanism of the HBT-Ome and its product molecule by using density functional theory and time-dependent density functional theory. Based on polarizable continuum model (PCM) with the integral equation formalism variant (IEFPCM) and Becke's three-parameter hybrid exchange function with the Lee-Yang-Parr gradient-corrected functional (B3LYP) as well as the TZVP basis, the optimized structures are obtained. The structures show that the HBT-Ome product molecules tend to undergo proton transfer in the excited state but HBT-OMe molecules cannot undergo the proton transfer process. The analysis of frontier molecular orbitals not only explains the reason why the fluorescence of the HBT-Ome product is enhanced, but also demonstrates that the HBT-Ome fluorescence intensity is diminished owing to twisted intramolecular charge transfer in the excited state. It is twisted intramolecular charge transfer that leads smaller charge density to be overlapped and the fluorescence intensity of HBT-OMe molecule to be further weakened. Infrared vibrational spectrum shows the enhancement of intramolecular hydrogen bond of O—H, which indicates the tendency of proton transfer. The molecular covalent interaction analysis shows that the intramolecular interactions of HBT-OMe remain largely unchanged clearly. The intramolecular O—H bonding interaction is weakened, and the N—H bonding interaction is increased for HBT-OMe product molecule. The enhancement of intramolecular hydrogen bond of N—H further illustrates the trend of proton transfer. The calculated potential energy curve provides direct evidence for the occurrence of ESIPT in the HBT-Ome product molecule. Our work is of great significance in designing and synthesizing the HClO fluorescent probes based on ESIPT molecules.

Keywords: excited-state intramolecular proton transfer, time dependent density functional theory, HClO

PACS: 31.10.+z, 31.15.A-, 82.39.Jn, 31.15.ee, 87.15.ht

DOI: 10.7498/aps.72.20222313

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11904126).

† Corresponding author. E-mail: xiaojunliuqhr@163.com

基于激发态分子内质子转移过程的HBT-OMe分子检测HClO的荧光增强机理

刘晓军 杨雪

Mechanism of fluorescence enhancement of HClO detected by excited-state intramolecular proton transfer based HBT-OMe molecule

Liu Xiao-Jun Yang Xue

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 113101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222313

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222313>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

几种典型含能材料光激发解离的含时密度泛函理论研究

Theoretical research of time-dependent density functional on initiated photo-dissociation of some typical energetic materials at excited state

物理学报. 2021, 70(20): 203301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210670>

胆红素分子激发态性质的密度泛函理论研究

Density functional theory studies on the excited-state properties of Bilirubin molecule

物理学报. 2020, 69(16): 163101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200518>

利用飞秒受激拉曼光谱技术研究Pyranine分子激发态质子传递过程

Excited state proton transfer processes of pyranine studied by femtosecond stimulated Raman spectroscopy

物理学报. 2020, 69(19): 198201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200230>

激发态丰质子核的双质子发射

Two-proton emission from excited states of proton-rich nuclei

物理学报. 2022, 71(6): 062301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211839>

基于原子轨道基的实时密度泛函理论:方法及应用

Real-time time dependent density functional theory with numerical atomic orbital basis set: methodology and applications

物理学报. 2018, 67(12): 120201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180487>

激发态电荷转移有机体的多铁性研究

Excited charge-transfer organics with multiferroicity

物理学报. 2018, 67(15): 157509 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180759>