• 研究论文 •

9,9-二-(3-(9-苯咔唑基))-2,7-芘基芴的光电性质

韩立志^a 王卓^a 华英杰^a 任爱民^b 刘艳玲^{*,a} 刘朋军^{*,a}

(^a海南师范大学化学与化工学院 海口 571158)

(^b吉林大学理论化学计算国家重点实验室 长春 130023)

摘要 芴类化合物作为有机电致发光材料近年来引起了人们的广泛关注, 其具有高亮度和高工作效率等性能. 本论文采用量子化学方法研究了一种新型的芴类发光材料, 9,9-二-(3-(9-苯咔唑基))-2,7-芘基芴的光电性质. 具体研究内容包括基态和激发态几何结构、前线分子轨道、能隙、电离能、电子亲和势、重组能以及吸收光谱和发射光谱等. 理论计算结果表明, 9,9-二-(3-(9-苯咔唑基))-2,7-芘基芴发射光谱为 450.6 nm, 其在电致发光器件应用上是一种具有开发前景和实用价值的蓝光发光材料.

关键词 电致发光; 芴; 芘; 咔唑; 密度泛函理论

Optoelectronic Properties of 9,9-Bis-(3-(9-phenyl-carbazoyl))-2,7-dipyrenylfluorene

Han, Lizhi^a Wang, Zhuo^a Hua, Yingjie^a Ren, Aimin^b

Liu, Yanling^{*,a} Liu, Pengjun^{*,a}

(^a College of Chemistry and Chemical Engineering, Hainan Normal University, Haikou 571158)

(^b State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Jilin University, Changchun 130023)

Abstract Fluorene derivatives have attracted considerable attention in recent years as organic light-emitting materials due to their high brightness and high performance. In this paper, theoretical analysis on optoelectronic properties of a novel emitting material, 9,9-bis-(3-(9-phenyl-carbazoyl))-2,7-dipyrenylfluorene (DCDPF) is systematically characterized by quantum-chemical methods. And the authors pay attention to its geometric structures of the ground state and excited state, frontier molecular orbital, energy gap, ionization potential, electron affinity, reorganization energy, absorption and emission spectra. All the calculated results show that the molecule gives rise to fluorescent emission at 450.6 nm and is promising as a blue light emitting material in the organic light-emitting diodes (OLEDs).

Keywords electroluminescence; fluorene; pyrene; carbazole; density functional theory (DFT)

几十年来, 人们广泛关注于发展高效的、稳定的和纯的有机电致发光材料来应用于有机发光二极管上. 为了满足发射光谱覆盖整个可见光区域的需要, 人们合成出了许多红色、绿色、蓝色的新型发光材料. 在各种电致发光材料中, 芴被誉为最有可能商业化的蓝光材料之

一, 它具有良好的热力学稳定性、物理形态以及较高的工作效率等优点^[1~4]而被用于发光二极管、太阳能电池、场效应晶体管、塑料激光等. 芴是一个相当好的蓝光发色团^[5~9], 其在 310~340 nm 区域有相当强的紫外吸收, 荧光发射区域约在 360~380 nm, 但自身有产生激子发

* E-mail: liuy178@yahoo.com.cn

Received June 6, 2011; accepted November 8, 2011.

Project supported by the Open Project of the State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry of Jilin University, the Natural Science Foundation of Hainan Province of China (No. 210017), and Doctoral Scientific Research Foundation of Hainan University.

吉林大学理论化学计算国家重点实验室开放课题、海南省自然科学基金(No. 210017)、海南师范大学博士科研启动基金资助项目.

射的趋势导致并不适合应用于有机电致发光器件中,对茈进行改性势在必行. 咔唑因为具有较高的三线态能量和空穴传输能力而常被用作给体,在不同的情况下咔唑可以发红光,绿光,甚至蓝光,而茈通常被选作受体有好的电子接受能力. 因此,目前茈、茈与咔唑组合的发光材料是人们研究的一个热点^[10-12].

最近,人们在实验上合成出了 9,9-二-(3-(9-苯基咔唑基))-2,7-茈基茈^[13],如图1所示. 在分子中心茈环9-位上引入咔唑基团,使这种有机分子体系具有一种螺旋连接的蝴蝶形状的分子结构. 这种刚性的螺旋型骨架可以增加分子的热力学稳定性和玻璃态转化温度,并且这种空间非平面结构可以避免分子间的 π - π 堆积或者激基缔合物的形成以及发射光谱的红移. 此外,引入的咔唑基团还可以改善分子的空穴注入和传输性能,使其具有高亮度和高工作效率等性能,应用于深蓝色荧光材料. 本文采用量子化学方法进一步研究该分子的电子结构,以及它的荧光特性,并和无咔唑基团的类分子 2,7-茈基茈(2,7-dipyrenylfluorene, DPF)、引入一个咔唑基团的类分子 9-(3-(9-苯基咔唑基))-2,7-茈基茈(9-(3-(9-phenylcarbazoyl))-2,7-dipyrenylfluorene, DDPF)进行了比较,以证实其潜在的应用能力.

图1 DCDPF 分子结构示意图

Figure 1 Sketch map of the structure of DCDPF

1 计算方法

采用 DFT/B3LYP/6-31G(d)方法对 2,7-茈基茈、9-(3-(9-苯基咔唑基))-2,7-茈基茈、9,9-二-(3-(9-苯基咔唑基))-2,7-茈基茈分子及离子进行了几何优化,采用 6-311++G(d,p)基组进一步计算了各分子和离子的单点能,获得了该类分子的前线轨道图形及能量、能隙、电离能、电子亲和势和重组能. 在从头算 Hartree-Fock (HF)方法优化得到稳定构型基础上,结合单激发组态相互作用(Single excitation configuration interaction, CIS)方法,计算了分子的激发态构型. 此外,为了获得分子的电子光谱,采用含时密度泛函理论(Time-dependent density functional theory, TDDFT)方法,在相同基组水平上计算了

分子的吸收光谱和发射光谱. 全部计算采用 Gaussian 03 程序包在曙光天演 EP850-GF2 服务器上完成.

2 结果和讨论

2.1 分子的几何构型

采用 DFT、HF 和 CIS 方法对 9,9-二-(3-(9-苯基咔唑基))-2,7-茈基茈分子进行几何优化,得到基态和激发态分子的稳定构型,优化后的分子呈一种螺旋连接的蝴蝶型结构(DFT 方法获得基态分子构型如图2所示). 分子的部分几何参数,如键长、键角及二面角列于表1. 由表1可知,除了茈环和茈环之间二面角外,DFT 和 HF 方法计算得到的分子基态几何构型参数相近,键长相差小于 2.0 pm,键角仅相差 0.1°,HF 方法得到的茈环和茈环之间的二面角为 61.0°,比 DFT 方法计算的数值大 9.3°. 当电子发生跃迁时,9,9-二-(3-(9-苯基咔唑基))-2,7-茈基茈分子几何构型发生改变,由基态转变成激发态. 比较表1中 HF 和 CIS 方法计算结果可知,分子中键角变化微小,小于 0.4°,分子结构改变主要发生在茈环中的键长及茈环与茈环之间的键长和二面角. 例如,茈环中 C(1)—C(2), C(4)—C(5), C(6)—C(7)键缩短, C(2)—C(3), C(3)—C(4), C(5)—C(6), C(1)—C(6)键伸长,变化小于 4.0 pm. 分子中茈环和茈环之间键长[C(3)—C(14)和 C(11)—C(17)]由 149.6 pm 缩短到 145.9 pm,约 3.7 pm,二面角由 61.0°减小到 38.8°,约 21.2°. 另外,在分子中心茈环 9-位引入的咔唑基团使整个分子呈螺旋连接的蝴蝶型结构,并且在电子激发过程中咔唑基团几何结构几乎不改变,这说明在分子中心茈环 9-位上引入咔唑基团可以抑制分子间 π - π 堆积或者激基缔合物形成,增加分子的热力学稳定性,避免发射光谱红移.

图2 DFT/B3LYP/6-31G(d)方法优化化合物 DCDPF 分子的基态结构

Figure 2 Ground structure of compound DCDPF optimized by DFT/B3LYP/6-31G(d)

2.2 分子的电学性质

我们知道有机电致发光材料的前线分子轨道与其

表 1 B3LYP、HF 和 CIS 方法优化化合物 DCDPF 得到基态和最低单激发态主要的几何结构参数

Table 1 Main optimized geometry structural parameters of compound DCDPF in the ground and lowest excited states at B3LYP, HF, and CIS levels, respectively (the atomic numbering scheme as seen in Figure 1)

Parameter	DFT	HF	CIS
Bond length/pm			
C(1)—C(2)	138.8	138.2	136.4
C(2)—C(3)	140.8	139.3	141.6
C(3)—C(4)	140.9	139.6	142.0
C(4)—C(5)	139.4	138.4	136.7
C(5)—C(6)	139.7	138.6	140.8
C(1)—C(6)	140.7	139.0	141.5
C(6)—C(7)	146.5	147.0	142.3
C(1)—C(9)	154.2	153.9	153.9
C(3)—C(14)	148.9	149.6	145.9
C(11)—C(17)	148.9	149.6	145.9
C(9)—C(20)	154.6	154.5	154.4
C(9)—C(27)	154.6	154.5	154.4
Bond angle/(°)			
C(2)-C(3)-C(14)	119.8	119.9	120.3
C(3)-C(14)-C(15)	118.1	118.2	118.1
C(10)-C(11)-C(17)	119.8	119.9	120.3
C(11)-C(17)-C(18)	118.1	118.2	118.1
C(1)-C(9)-C(20)	108.2	108.3	108.1
C(8)-C(9)-C(27)	108.2	108.3	108.1
Dihedral angle/(°)			
C(2)-C(3)-C(14)-C(15)	51.7	61.0	38.8
C(10)-C(11)-C(17)-C(18)	51.7	61.0	38.8
C(1)-C(9)-C(20)-C(21)	86.4	86.7	87.1
C(8)-C(9)-C(27)-C(28)	86.4	86.7	87.1
C(23)-N(24)-C(25)-C(26)	55.0	72.5	73.5
C(30)-N(31)-C(32)-C(33)	55.0	72.5	73.5

跃迁性质及电子和空穴注入传输性能密切相关. DFT 方法和 HF 方法获得的前线分子轨道图形十分相似, 图 3 给出了 DFT 方法得到的 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子的前线分子轨道图形, 包括最高占据轨道(highest occupied molecular orbital, HOMO)和最低空轨道(lowest unoccupied molecular orbital, LUMO). 从图 3 可知, 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子的前线轨道呈 π 共轭特征, 无论 HOMO 轨道还是 LUMO 轨道, 电子云均主要集中在分子中萘环和芴环上, 而取代基咪唑基团并不在 π 共轭区域内, 说明电子跃迁时, 分子中咪唑基团结构基本不变, 结构发生变化的主要是分子中萘环和取代基芴环, 这和上述结构分析一致. 另外, 在图 4 中给出了 2,7-萘基芴和 9-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分

子的最高占据轨道和最低空轨道图形, 和 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子相似, 在 HOMO 和 LUMO 轨道中, 电子云主要集中在萘环和芴环.

图 3 DFT 方法得到的化合物 DCDPF 的前线分子轨道
Figure 3 Frontier molecular orbitals of compound DCDPF by DFT

分子的最高占据轨道能量 ϵ_{HOMO} 是分子给出电子能力的量度, 与分子的电离能相关, ϵ_{HOMO} 越低则该轨道中的电子越稳定, 分子给出电子的能力越小; 反之, 分子的 ϵ_{HOMO} 越高, 则该分子越容易提供电子. 分子的最低空轨道的能量 ϵ_{LUMO} 与分子的电子亲和势有关, 其值越低, 该分子接受电子的能力越强. 因此这两个轨道决定分子的电子得失和转移能力等重要化学性质. 最低空轨道和最高占有轨道的能量差即 HOMO-LUMO 能隙($\Delta_{\text{H-L}}$)是反应分子发光和导电性质的一个重要参数. 在实验上也可获得能隙, 最常用的是光学带隙 E_g , 它是从分子的吸收光谱中获得的. 从表 2 可知, 2,7-萘基芴、9-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴、9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子的 ϵ_{HOMO} 依次升高, 即: $-5.38 \text{ eV} \rightarrow -5.34 \text{ eV} \rightarrow -5.32 \text{ eV}$, 说明在 2,7-萘基芴 9-位引入咪唑基团时, 可以改善分子的空穴注入性能, 使空穴注入能力增强. DFT 方法计算 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子的 ϵ_{HOMO} 和 ϵ_{LUMO} 数值虽与实验值有一定差异, 但也能反映出 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子具有良好的空穴或者电子注入性能. 此外, 三种分子的 HOMO-LUMO 能隙及其光学带隙较宽, 数值间相差微小, 如 $\Delta_{\text{H-L}}$ 数值分别为 3.41, 3.40, 3.40 eV, 说明咪唑基团的引入并不会影响该类分子的能隙, 该类分子应为蓝光材料.

图4 DFT方法得到的化合物DPF和CDPF的前线分子轨道

Figure 4 Frontier molecular orbitals of compounds DPF and CDPF by DFT

表2 化合物DPF, CDPF和DCDPF的电化学性质(单位: eV)

Table 2 Electrochemical properties of compounds DPF, CDPF and DCDPF (in eV)

	$-\varepsilon_{\text{HOMO}}$	Exp ^a	$-\varepsilon_{\text{LUMO}}$	Exp ^b	$\Delta_{\text{H-L}}$	$E_{\text{g}}(\text{TD})$	IP _(v)	IP _(a)	HEP	EA _(v)	EA _(a)	EEP	λ_{hole}	$\lambda_{\text{electron}}$
DPF	5.38		1.97		3.41	3.15	6.30	6.23	6.15	1.06	1.16	1.27	0.15	0.21
CDPF	5.34		1.94		3.40	3.13	6.20	6.15	6.07	1.06	1.16	1.27	0.13	0.21
DCDPF	5.32	5.9	1.92	3.0	3.40	3.11	6.10	6.08	6.01	1.08	1.18	1.30	0.09	0.22

^a在紫外光电子能谱(UPS)中测量^[13], ^b由HOMO及紫外吸收光谱中最低激发的起峰值获得^[13].

为了进一步分析 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-茈萘分子的电荷注入、传输性能,我们采用 DFT 方法计算了三种分子的三种电离能和电子亲和势以及空穴和电子重组能. 三种电离能分别是垂直电离能(Vertical potential, IP_(v)), 为 M (分子)和 M⁺(正离子)的能量差, 用 M 分子几何, 它近似等于 HOMO 能量的负值 (Koopmans 定理); 绝热电离能(Adiabatic potential, IP_(a)), M: 分子几何, M⁺: M⁺离子几何, 用二者能量差, 需对 M⁺进行几何优化; 空穴抽取能(Hole extraction potential, HEP), 即 M⁺→M 的能量变化, 需用 M⁺几何. 三种电子亲和势分别是垂直电子亲和势 (Vertical electron affinity, EA_(v)), M (分子)和 M⁻ (负离子)的能量差, 用 M 分子几何; 绝热电子亲和势 (Adiabatic electron affinity, EA_(a)), M: 分子几何, M⁻: M⁻离子几何, 用二者能量差, 需对 M⁻进行几何优化; 电子抽取能 (Electron extraction potential, EEP), 即 M⁻→M 的能量变化, 需用 M⁻几何. 电离能越小, 越易接受空穴; 而电子亲和势越大, 则越易接受电子. 分析表 2 中的数据可知, 三种分子均具有较小的电离能和较大的电子亲和势, 这类分子既可作为空穴注入型材料也可作为电子注入型材料, 并且在分子中引入咪唑基团可以降低分子的电离能, 改善分子的空穴注入性能, 同时不降低分子的电子注入性能. 三种分子中 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-茈萘分子的空穴注入性能最佳.

目前, 大多数共轭发光材料在室温条件下的电荷传输机理被假设为蛙跳机理. 在共轭体系中两个相邻单元间, 空穴迁移过程可以概括如下:

其中 M 代表发生电荷迁移的中性物体, 而 M⁺物体则含有一个空穴. 若温度足够高, 那么根据经典的 Marcus/Hush 模型, 空穴迁移速率为^[14,15]:

$$k_{\text{hole}} = \left(\frac{\pi}{\lambda k_{\text{B}} T} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{V^2}{\hbar} \exp \left(-\frac{\lambda}{4 k_{\text{B}} T} \right) \quad (1)$$

其中 T: 温度, k_B: Boltzmann 常数, V: 两种物体(即 M⁺和 M)之间的耦合矩阵元, 主要由轨道重叠决定. λ: 重组能, 伴随着电荷转移时产生一种几何弛豫而带来的能量变化, 因忽略了外部环境的影响, 这里主要指的是内部重组能. 式中 λ 在指数上, λ 愈小, k 愈大, 所以电荷传输可用 λ 来衡量, λ 愈小愈好. 那么对于空穴迁移来说重组能为:

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_+ = (E_0^* - E_0) + (E_+^* - E_+) \quad (2)$$

如图 5 所示, E₀ 和 E₊ 代表中性分子几何下的中性分子和阳离子能量, E₀^{*} 和 E₊^{*} 代表阳离子几何下的中性分

子和阳离子能量, λ_+ 代表正离子核坐标变化(从正离子能量极小值的几何变到中性分子能量极小值的几何)产生的重组能, λ_0 代表中性分子核坐标变化(从中性分子能量极小值的几何变到正离子能量极小值的几何)产生的重组能. 那么空穴迁移所需要的重组能(λ_{hole}):

$$\lambda_{\text{hole}} = \text{IP}(\text{v}) - \text{HEP} \quad (3)$$

同理可推出计算电子迁移所需的重组能($\lambda_{\text{electron}}$):

$$\lambda_{\text{electron}} = \text{EEP} - \text{EA}(\text{v}) \quad (4)$$

图5 空穴转移的内重组能

Figure 5 Internal reorganization energy for hole transfer

从电荷传输性能考虑, 如表 2 所示, 三种分子的空穴重组能和电子重组能数值均较小, 且空穴重组能小于电子重组能, 说明该类分子更适合作为空穴传输型发光材料. 更为重要的是, 当咪唑基团引入分子时, 分子的空穴重组能减小, 空穴传输性能增加, 三种分子中 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子的空穴传输性能最好, 它的空穴重组能仅为 0.09 eV.

2.3 分子的电子光谱

采用 TDDFT//B3LYP/6-31G(d)方法在基态和激发态几何基础上计算了 2,7-萘基芴、9-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴和 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴的

电子光谱, 即吸收光谱和发射光谱. 另外, 根据爱因斯坦跃迁概率公式, 计算了 3 种分子的荧光寿命(单位: au)^[16,17]:

$$\tau = \frac{c^3}{2(E_{\text{Flu}})^2 f} \quad (5)$$

其中 c 为真空光速, E_{Flu} 为跃迁能, f 为跃迁的振子强度. 分子的最大吸收或发射波长、跃迁形式及相应的振子强度列于表 3 中. 分析表 3 可知, 所有的跃迁均为 $\pi \rightarrow \pi^*$ 跃迁. 最大振子强度对应的分子最大吸收或发射波长均主要由 S_0 和 S_1 之间的跃迁组成, 轨道贡献主要集中在 HOMO 和 LUMO 轨道之间. 在 2,7-萘基芴 9-位引入咪唑基团时, 分子的吸收光谱和发射光谱发生轻微红移, 即吸收光谱: 393.8 nm (DPF) < 396.2 nm (CDPF) < 398.8 nm (DCDPF); 发射光谱: 441.0 nm (DPF) < 443.8 nm (CDPF) < 450.6 nm (DCDPF), 三种分子的发射光谱数值均落在蓝光可见光区域内, 其中 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子的最大发射波长理论计算值与实验值吻合较好, 尤其是与固体薄膜中测量值仅相差 2.4 nm. 另外, 3 种分子的斯托克位移和荧光寿命也相差较小, 分别为 47.2 nm (DPF) < 47.6 nm (CDPF) < 51.8 nm (DCDPF); 1.88 ns (DPF, E_{Flu} : 2.81 eV) < 1.93 ns (CDPF, E_{Flu} : 2.79 eV) < 1.94 ns (DCDPF, E_{Flu} : 2.75 eV). 上述数据表明, 在 2,7-萘基芴 9-位引入咪唑基团对分子的光学性质影响较小.

3 结论

采用 DFT, TDDFT, HF 和 CIS 方法等讨论了 9,9-二-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴分子的光学和电子性质, 并和无咪唑基团分子 2,7-萘基芴、引入一个咪唑基团分子 9-(3-(9-苯咪唑基))-2,7-萘基芴进行了比较. 根据计算

表3 化合物 DPF, CDPF 和 DCDPF 的光学性质

Table 3 Optical properties of compounds DPF, CDPF and DCDPF

Molecule	Electronic transition	TDDFT//B3LYP/6-31G(d)			Exp. ^a	Exp. ^b
		λ/nm	f	Main configurations		
Absorption						
DPF	S ₀ →S ₁	393.8	1.20	HOMO→LUMO	0.67	
CDPF	S ₀ →S ₁	396.2	1.16	HOMO→LUMO	0.67	
DCDPF	S ₀ →S ₁	398.8	1.06	HOMO→LUMO	0.66	
Emission						
DPF	S ₁ →S ₀	441.0	1.55	LUMO→HOMO−1	−0.10	
				LUMO→HOMO	0.63	
CDPF	S ₁ →S ₀	443.8	1.53	LUMO→HOMO	0.63	
DCDPF	S ₁ →S ₀	450.6	1.57	LUMO→HOMO	0.67	423 453

^a 在二氯甲烷溶液中测量^[13]; ^b 在固体薄膜中测量^[13].

结果得到以下结论: 由分子几何构型可知, 9,9-二-(3-(9-苯呋唑基))-2,7-萘基芴分子具有一种螺旋连接的蝴蝶型结构, 电子跃迁对呋唑基团结构几乎没有影响, 结构的主要变化发生在萘环和芴环; 从电化学性质分析可知, 在 2,7-萘基芴分子 9-位引入呋唑基团, 可以改善分子空穴注入/传输性能, 同时不影响它的电子注入/传输性能. 三种分子中 9,9-二-(3-(9-苯呋唑基))-2,7-萘基芴分子具有最佳的空穴注入/传输性能, 且优于其电子注入/传输性能; 从电子光谱可知, 呋唑基团的引入对分子的光学性质影响微小, 分子的最大发射波长落在蓝光可见光区域. 因此, 在该类分子中, 9,9-二-(3-(9-苯呋唑基))-2,7-萘基芴分子在电致发光器件的应用上是一种具有开发前景和实用价值的蓝光发光材料.

References

- 1 Liu, Y.-L.; Feng, J.-K.; Ren, A.-M. *J. Phys. Org. Chem.* **2007**, *20*, 600.
- 2 Liu, Y.-L.; Feng, J.-K.; Ren, A.-M. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *28*, 3157.
- 3 Wang, J.; Wan, W.; Jiang, H.-Z.; Gao, Y.; Jiang, X.-Y.; Lin, H.-P.; Zhao, W.-M.; Hao, J. *Org. Lett.* **2010**, *12*, 3874.
- 4 Cocherel, N.; Poriol, C.; Vignau, L.; Bergamini, J.-F.; Rault-Berthelot, J. *Org. Lett.* **2010**, *12*, 452.
- 5 Tang, C. *Ph.D. Dissertation*, Fudan University, Shanghai, **2006** (in Chinese).
(唐超, 博士论文, 复旦大学, 上海, **2006**.)
- 6 Zhang, Q.-C.; Divayana, Y.; Xiao, J.-C.; Wang, Z.-J.; Tiekink, Z. R. T.; Doung, H. M.; Zhang, H.; Boey, F.; Sun, X.-W.; Wudi, F. *Chem. Eur. J.* **2010**, *16*, 7422.
- 7 Sonar, P.; Soh, M. S.; Cheng, Y. H.; Henssler, J. T.; Sellinger, A. *Org. Lett.* **2010**, *12*, 3292.
- 8 Xue, Z.; Gao, C.-X.; Lu, M.-B.; Zhang, Y.-X. *Guangzhou Chem. Ind.* **2010**, *38*, 31 (in Chinese).
(薛震, 高昌轩, 卢明宝, 张玉祥, 广州化工, **2010**, *38*, 31.)
- 9 Huang, M.-R.; Huang, S.-J.; Li, X.-G. *Chem. Ind. Eng. Prog.* **2011**, *30*, 365 (in Chinese).
(黄美荣, 黄绍军, 李新贵, 化工进展, **2011**, *30*, 365.)
- 10 Zhang, F.-F.; Zhou, C.-H.; Yan, J.-P. *Chin. J. Org. Chem.* **2010**, *30*, 783 (in Chinese).
(张飞飞, 周成合, 颜建平, 有机化学, **2010**, *30*, 783.)
- 11 Kong, S.-S.; Zhao, L.; Li, Y.-B.; Li, Y.-W.; Li, S.-J.; Zhao, J. *J. Funct. Polym.* **2010**, *23*, 207 (in Chinese).
(孔霜霜, 赵雷, 李远兵, 李亚伟, 李淑静, 赵娟, 功能高分子学报, **2010**, *23*, 207.)
- 12 Gao, J.; Liu, Y.; Tan, H.; Li, L.; Cao, Y.-B. *Acta Chim. Sinica* **2010**, *68*, 661 (in Chinese).
(高健, 刘煜, 谭华, 李亮, 曹韵波, 化学学报, **2010**, *68*, 661.)
- 13 Tao, S.-L.; Zhou, Y.-C.; Lee, C.-S.; Zhang, X.-H.; Lee, S.-T. *Chem. Mater.* **2010**, *22*, 2138.
- 14 Marcus, R. A. I. *J. Chem. Phys.* **1956**, *24*, 966.
- 15 Marcus, R. A. *Rev. Mod. Phys.* **1993**, *65*, 599.
- 16 Litani-Barzilai, I.; Bulatov, V.; Schechter, I. *Anal. Chim. Acta* **2004**, *501*, 151.
- 17 Lukeš, V.; Aquino, A.; Lischka, H. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 10232.

(A1106061 Lu, Y.)