

笏酮及咪唑衍生物在溶液中之光物理與光化學研究

學生：鍾思敏

指導教授：刁維光博士

國立交通大學應用化學所碩士班

摘 要

本論文主要分為兩大主題。第一主題在探討笏酮分子 (9-Fluorenone, 9F) 及其衍生物 1-羥基笏酮分子 (1-Hydroxy-9-Fluorenone, 1-HOF) 在不同極性溶劑中的光譜與動力行為。第二主題為藉由量子化學計算來解釋在發藍光二極體中，可作為電洞傳輸層和發光層的咪唑衍生物 2,7-DPVTcz 及 3,6-DPVTcz 分子在螢光量子產率上極大差異的現象。在第一主題部份，我們利用時間相關單光子技術系統 (Time-Correlated Single Photon Counting, TCSPC) 來研究 9F 及其衍生物 1-HOF 溶於不同溶劑中的動態學。我們發現 9F 分子在非極性正己烷溶液中的螢光衰減曲線包含了兩個指數函數衰減，其主要的衰減生命期為~ 110 ps，而另一長時間的衰減生命期為 1.5 ns。在極性二甲基亞砷溶液中，螢光衰減生命期為 15 ns。1-HOF 分子在非極性正己烷溶液中的螢光衰減曲線包含了短時間的衰減過程 (時間常數小於儀器的時間解析度) 及長時間的衰減過程 (時間常數約為 1.1 ns)。配合高階理論計算的結果，我們發現羰基非平面振動路徑對於笏酮分子的激發態緩解過程具有極大影響。

第二主題在於利用量子化學原理對咪唑衍生物 2,7-DMVECz 及 3,6-DMVECz 分子在法蘭克-康登組態 (Franck-Condon, FC state)、第一激發單重態 (the first singlet state, S_1) 和過渡組態 (Transition State, TS) 進行結構最佳化及激發態能量的理論計算。計算的結果顯示，3,6-咪唑分子衍生物具有經由碳碳單鍵轉動的有效系統間轉換而去活化的特性；然而在 2,7-咪唑分子衍生物中，由於電子可完整地在分子內共振而造成原先在

基態易轉動的碳碳單鍵在激發態具有較剛硬而不易轉動的雙鍵特性，因而導致其無法在激發態產生有效的去活化過程。我們的計算結果可以合理解釋在 2,7-DPVTCz 及 3,6-DPVTCz 分子所觀測到其螢光量子產率 (Φ_F) 的極大差距 (前者 $\Phi_F = 0.5$ 而後者 $\Phi_F \sim 0.01$)。

