

# 目 錄

	頁次
中文摘要.....	i
英文摘要.....	iii
致謝.....	v
目錄.....	vi
表目錄.....	ix
圖目錄.....	xi
附錄目錄.....	xvii
第一章、序論.....	1
1.1    研究動機.....	1
1.2    芳香碳氫化合物的基本特性.....	5
1.3    發光二極體的基本原理.....	5
1.4    笏酮及其衍生物的靜態光譜及動態學相關研究.....	7
1.4.1    笏酮分子的光物理過程.....	7
1.4.2    羥基笏酮分子的光物理過程.....	11
1.5    本論文的研究.....	14
第二章、實驗技術.....	16
2.1    時間相關單光子計數系統.....	16
2.2    螢光光柵系統.....	18



2.3	紫外-可見光譜儀.....	19
2.4	螢光光譜儀.....	19
2.5	資料分析.....	19
2.6	樣品處理.....	21
2.7	電子結構計算.....	22
2.7.1	量子化學的基本原則.....	22
2.7.2	量子化學理論方法.....	23
2.7.3	基底含數.....	26
2.7.4	結構最佳化及頻率運算.....	27
2.7.5	激發態運算.....	28
2.7.6	自洽反應場理論.....	29
2.7.7	量子化學計算程式.....	30
		
	第三章、笏酮及其衍生物在溶液中的光譜及動力學.....	31
3.1	9F 及 1-HOF 之吸收及螢光光譜.....	31
3.2	9F 及 1-HOF 之激發態生命期的量測.....	35
3.2.1	9F 之激發態生命期的量測.....	35
3.2.2	1-HOF 之激發態生命期的量測.....	38
3.3	9F 及 1-HOF 之理論計算.....	46
3.3.1	9F 法蘭克-康登組態理論計算與吸收光譜之模擬.....	47
3.3.2	9F 之激發態位能面掃描計算.....	52
3.3.3	1-HOF 之法蘭克-康登組態理論計算與吸收光譜之模擬.....	57
3.3.4	1-HOF 之激發態組態理論計算.....	58
3.4	討論.....	61

3.4.1	9F 在不同極性溶液中之激發態緩解機制.....	62
3.4.2	9F 及 1-HOF 在非極性溶液中之激發態緩解機制.....	65
3.5	結論.....	66
第四章、呋唑衍生物激發態之理論計算.....		68
4.1	研究動機.....	68
4.2	2-DMVECz、3-DMVECz、3-EECz、2,7-DMVECz 及 3,6-DMVECz 之理論計算.....	71
4.2.1	2-DMVECz、3-DMVECz 及 3-EECz 之法蘭克-康登組態及沿碳碳 單鍵扭轉反應路徑位能面掃描的理論計算.....	71
4.2.2	2,7-DMVECz 及 3,6-DMVECz 之法蘭克-康登組態理論計算.....	75
4.2.3	2,7-DMVECz 及 3,6-DMVECz 之 $S_1$ (min) 理論計算.....	81
4.2.4	2,7-DMVECz 及 3,6-DMVECz 沿碳碳鍵轉動路徑之垂直構型結構 ( $P_1$ 及 $P_2$ ) 的理論計算.....	81
4.3	綜合討論.....	88
4.4	結論.....	98
附錄 A.....		A1
附錄 B.....		B1
附錄 C.....		C1

# 表 目 錄

	頁次
表 3.1	9F 正己烷溶液的 TCSPC 擬合結果..... 38
表 3.2	9F 二甲基亞砷溶液的 TCSPC 擬合結果..... 41
表 3.3	1-HOF 正己烷溶液的 TCSPC 擬合結果..... 46
表 3.4	1-HOF 正己烷溶液的 FOG 擬合結果..... 46
表 3.5	9F 正己烷溶液在 FC 結構下的 TDDFT 計算結果..... 48
表 3.6	9F 二甲基亞砷溶液在 FC 結構下的 TDDFT 計算結果..... 49
表 3.7	9F 正己烷溶液在 FC 結構下利用不同 TDDFT 計算結果..... 50
表 3.8	9F 二甲基亞砷溶液在 FC 結構下利用不同 TDDFT 計算結果..... 51
表 3.9	9F 正己烷溶液在 $S_1$ (min) 結構下的 TDDFT 計算結果..... 53
表 3.10	9F 二甲基亞砷溶液在 $S_1$ (min) 結構下的 TDDFT 計算結果..... 54
表 3.11	1-HOF 旋轉異構體正己烷溶液的基態結構最佳化的比較..... 58
表 3.12	1-HOF 正己烷溶液在 FC 結構下的 TDDFT 計算結果..... 59
表 3.13	1-HOF 正己烷溶液在 $S_1$ (min) 結構下的 TDDFT 計算結果..... 60
表 3.14	9F 及 1-HOF 在溶液中激發態光物理過程時間常數..... 61
表 3.15	9F 乙腈溶液的 TCSPC 擬合結果..... 65
表 4.1	2,7-DMVECz 之 FC TDDFT 計算結果..... 79
表 4.2	3,6-DMVECz 之 FC TDDFT 計算結果..... 80
表 4.3	2,7-DMVECz 之 $S_1$ (min) TDDFT 計算結果..... 85

表 4.4	3,6-DMVEcZ之 $S_1$ (sym) TDDFT計算結果.....	86
表 4.5	3,6-DMVEcZ之 $S_1$ (min) TDDFT計算結果.....	87
表 4.6	2,7-DMVEcZ之 $P_1$ TDDFT計算結果.....	93
表 4.7	2,7-DMVEcZ之 $P_2$ TDDFT計算結果.....	94
表 4.8	3,6-DMVEcZ之 $P_1$ TDDFT計算結果.....	95
表 4.9	3,6-DMVEcZ之 $P_2$ TDDFT計算結果.....	96



# 圖 目 錄

	頁次
圖 1.1 笏酮的分子結構及原子標號。.....	1
圖 1.2 笏酮分子在不同溶劑中的吸收及螢光光譜。樣品濃度為 $2 \times 10^{-3} M$ ，測量 螢光光譜所使用的激發波長皆為 375 nm。.....	2
圖 1.3 笏酮分子在不同溶劑中的時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm，偵 測波長為 500 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果。.....	2
圖 1.4 (A) 2,7-DPVECz 和 (B) 3,6-DPVECz 的分子結構及原子標號。.....	4
圖 1.5 分別為發光二極體的 (A) 發光原理及 (B) 基本結構。.....	6
圖 1.6 電致發光過程。.....	6
圖 1.7 笏酮分子在極性和非極性溶液的能階圖。.....	8
圖 1.8 1-羥基笏酮分子異構物結構。.....	12
圖 1.9 1-羥基笏酮分子在 $S_1$ 及 $S_0$ 分子內質子轉移過程位能曲線示意圖。(A) 利 用 AM1 計算法 (B) 利用 TDDFT 理論計算法。.....	13
圖 1.10 (A) 2-DMVECz (B) 3-DMVECz (C) 3-EECz (D) 2,7-DMVECz 及 (E) 3,6-DMVECz 的分子結構。.....	15
圖 2.1 TCSPC 的工作原理。.....	16
圖 2.2 Fluo Time 200 儀器配置圖。.....	17
圖 2.3 FOG100 儀器配置圖。.....	18
圖 2.4 分子位能面示意圖。.....	27
圖 2.5 Onsager 模型。.....	30

圖 2.6	PCM 模型。.....	30
圖 3.1	(A) 9F 正己烷溶液及 (B) 9F 二甲基亞砷溶液的 吸收及螢光光譜。樣品濃度為 $2 \times 10^{-3} M$ ， 測量螢光光譜所使用的激發波長皆為 375 nm。.....	32
圖 3.2	1-HOF 正己烷溶液的 吸收及螢光光譜。樣品濃度為 $5 \times 10^{-4} M$ ， 測量螢光光譜所使用的激發波長為 375 nm。.....	33
圖 3.3	在不同濃度下測得 9F 正己烷溶液的 (A) 吸收光譜及 (B) 螢光光譜。 測量螢光光譜所使用的激發波長皆為 375 nm。.....	34
圖 3.4	在不同濃度下測得 9F 二甲基亞砷溶液的 (A) 吸收光譜及 (B) 螢光光 譜。測量螢光光譜所使用的激發波長皆為 375 nm。.....	34
圖 3.5	在不同濃度下測得 1-HOF 正己烷溶液的 (A) 吸收光譜及 (B) 螢光光譜。 測量螢光光譜所使用的激發波長皆為 375 nm。.....	35
圖 3.6	激發 9-F 正己烷溶液 ( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )， 螢光波長為 (A) 440、(B) 520 及 (C) 600 nm 的 時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為 實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	36
圖 3.7	激發 9-F 正己烷溶液 ( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )， 螢光波長為 (A) 440、(B) 520 及 (C) 600 nm 的 時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為 實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	37
圖 3.8	激發 9F 正己烷溶液 ( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )， 螢光波長為 (A) 440、(B) 520 及 (C) 600 nm 的 時間-解析螢光光譜(利用 FluoFit 軟體)。激發波長 為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果， 點線為兩者之差。.....	39
圖 3.9	激發 9F 二甲基亞砷溶液 ( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )， 螢光波長為 (A) 480、(B) 560 及 (C) 680 nm 的 時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為 實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	40
圖 3.10	激發 1-HOF 正己烷溶液 ( $C_M = 5 \times 10^{-5} M$ )， 螢光波長為 (A) 440、(B) 540 及 (C) 680 nm 的 時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為 實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之	42
圖 3.11	激發 1-HOF 正己烷溶液 ( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )， 螢光波長為 (A) 460、(B) 560 及 (C) 680 nm 的 時間-解析螢光光譜。激發波長為 435 nm。圓圈為 實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	43

圖 3.12	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為(A) 480、(B) 500 及(C) 520 nm 的螢光光柵時間-解析螢光光譜。激發波長為 410 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	44
圖 3.13	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為(A) 540、(B) 560 及(C) 580 nm 的螢光光柵時間-解析螢光光譜。激發波長為 410 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	45
圖 3.14	由 TDDFT 理論計算所得 9F 在正己烷溶液中 FC 的分子軌域圖。.....	48
圖 3.15	由 TDDFT 理論計算所得 9F 在二甲基亞砷溶液中 FC 的分子軌域圖。.....	49
圖 3.16	(A) 9F 正己烷溶液及 (B) 9F 二甲基亞砷溶液的靜態吸收光譜根據理論計算所對應吸收頻帶的躍遷指派圖。.....	50
圖 3.17	由 TDDFT 理論計算所得 9F 在正己烷溶液中 $S_1$ (min) 的分子軌域圖。.....	53
圖 3.18	由 TDDFT 理論計算所得 9F 在二甲基亞砷溶液中 $S_1$ (min) 的分子軌域圖。.....	54
圖 3.19	9F 在正己烷溶液中，沿著羰基非平面振動路徑位能曲線圖。.....	55
圖 3.20	9F 在二甲基亞砷溶液中，沿著羰基非平面振動路徑位能曲線圖。.....	55
圖 3.21	9F 在正己烷溶液中，沿著羰基非平面振動路徑 ( $\alpha$ 從 $30^\circ$ 每間隔 $1^\circ$ 至 $49^\circ$ ) 位能曲線圖。.....	56
圖 3.22	9F 在二甲基亞砷溶液中，沿著羰基非平面振動路徑 ( $\alpha$ 從 $30^\circ$ 每間隔 $1^\circ$ 至 $49^\circ$ ) 位能曲線圖。.....	56
圖 3.23	9F 的 $S_1$ 結構在 (A) $\alpha = 35^\circ$ 與 (B) $\alpha = 36^\circ$ 時，差異最大之處。.....	57
圖 3.24	1-HOF 的兩種旋轉異構體。.....	57
圖 3.25	由 TDDFT 理論計算所得 1-HOF 在正己烷溶液中 FC 的分子軌域圖。.....	59
圖 3.26	1HOF 正己烷溶液的靜態吸收光譜根據理論計算所對應吸收頻帶的躍遷指派圖。.....	60
圖 3.27	由 TDDFT 理論計算所得 1-HOF 在正己烷溶液中 $S_1$ (min) 的分子軌域圖。.....	61

圖 3.28	9F 分子在不同溶劑環境下，偵測波長位置 520 nm 所測得的 TCSPC 螢光光譜。樣品濃度為 $2 \times 10^{-3} M$ ，激發波長為 405 nm。圈圈為實驗值，實線為擬合結果。右上縮圖，為 9F 正己烷溶液瞬態光譜的局部放大。.....	62
圖 3.29	9F 分子在非極性正己烷溶液中的光物理反應機制。.....	63
圖 3.30	9F 分子在非極性二甲基亞砷溶液中的光物理反應機制。.....	63
圖 3.31	激發 9F 乙腈溶液 ( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，偵測波長為 (A) 480、(B) 520 及 (C) 600 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	64
圖 3.32	在相同溶劑(n-Hexane)環境下，9F 和 1-HOF 分子，偵測波長位置 460 nm 所測得的 TCSPC 時間-解析螢光光譜。樣品濃度分別為 $2 \times 10^{-3} M$ 和 $5 \times 10^{-5} M$ ，激發波長為 375 nm。圈圈為實驗值，實線為擬合結果。.....	65
圖 3.33	1-HOF 分子在非極性正己烷溶液中的光物理反應機制。.....	66
圖 4.1	(A) 2,7-DPVCz 及 (B) 3,6-DPVCz 甲苯溶液 (實線) 及與 PMMA 相混後塗佈在玻璃上 (虛線) 的吸收及螢光光譜。樣品濃度為 $1 \times 10^{-5} M$ ，測量螢光光譜所使用的激發波長為 375 nm。.....	69
圖 4.2	(A) 2-DMVECz (B) 3-DMVECz (C) 3-EECz (D) 2,7-DMVECz 及 (E) 3,6-DMVECz 的分子結構。.....	70
圖 4.3	2-DMVECz 分子 FC 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子連接取代基碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	72
圖 4.4	3-DMVECz 分子 FC 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子連接取代基碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	73
圖 4.5	3-EECz 分子 FC 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子連接取代基碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	74
圖 4.6	為 (A) 2-DMVECz (B) 3-DMVECz (C) 3-EECz 分子沿著咪唑分子主體連接取代基的碳碳單鍵扭轉反應路徑的位能曲線圖。.....	76

圖 4.7	2,7-DMVECz 分子 FC 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	77
圖 4.8	3,6-DMVECz 分子 FC 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	78
圖 4.9	由 TDDFT 理論計算所得 2,7-DMVECz 在 FC state 的分子軌域圖。.....	79
圖 4.10	由 TDDFT 理論計算所得 3,6-DMVECz 在 FC state 的分子軌域圖。.....	80
圖 4.11	2,7-DMVECz 分子 $S_1$ (min) 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	82
圖 4.12	3,6-DMVECz 分子 $S_1$ (sym) 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	83
圖 4.13	3,6-DMVECz 分子 $S_1$ (min) 電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 (D) 鍵長及鍵角。.....	84
圖 4.14	由 TDDFT 理論計算所得 2,7-DMVECz 在 $S_1$ (min) 的分子軌域圖。.....	85
圖 4.15	由 TDDFT 理論計算所得 3,6-DMVECz 在 $S_1$ (sym) 的分子軌域圖。.....	86
圖 4.16	由 TDDFT 理論計算所得 3,6-DMVECz 在 $S_1$ (min) 的分子軌域圖。.....	87
圖 4.17	2,7-DMVECz 分子 $P_1$ 的電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 ( $\delta_1$ ) 固定在 $90^\circ$ 而 ( $\delta_2$ ) 的優化值為 $22.5^\circ$ (D) 鍵長及鍵角。.....	89
圖 4.18	2,7-DMVECz 分子 $P_2$ 的電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 $\delta_1$ 及 $\delta_2$ 皆固定在 $90^\circ$ (D) 鍵長及鍵角。.....	90
圖 4.19	3,6-DMVECz 分子 $P_1$ 的電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 咪唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 ( $\delta_2$ ) 固定在 $90^\circ$ 而 ( $\delta_1$ ) 的優化值為 $35.4^\circ$ (D) 鍵長及鍵角。.....	91

圖 4.20	3,6-DMVECz分子P <sub>2</sub> 的電子組態最佳化結構 (A) 俯視圖 (B) 側視圖 (C) 呋唑分子兩邊連接碳碳單鍵的二面角 $\delta_1$ 及 $\delta_2$ 皆固定在 90° (D) 鍵長及鍵角。.....	92
圖 4.21	由TDDFT理論計算所得 2,7-DMVECz在P <sub>1</sub> 的分子軌域圖。.....	93
圖 4.22	由TDDFT理論計算所得 2,7-DMVECz在P <sub>2</sub> 的分子軌域圖。.....	94
圖 4.23	由TDDFT理論計算所得 3,6-DMVECz在P <sub>1</sub> 的分子軌域圖。.....	95
圖 4.24	由TDDFT理論計算所得 3,6-DMVECz在P <sub>2</sub> 的分子軌域圖。.....	96
圖 4.25	(A) 2,7-DMVECz 及 (B) 3,6-DMVECz 沿著呋唑分子主體連接取代基的碳碳單鍵轉動反應路徑的位能面。.....	97
圖 4.26	(A) 2,7-DMVECz及 (B) 3,6-DMVECz在S <sub>1</sub> 激發態電子共振結構。.....	98



# 附 錄 目 錄

頁次

附錄 A-1	激發 9F 正己烷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (A) 430、(B) 440、(C) 450、(D) 460 及(E) 470 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A1
附錄 A-2	激發 9F 正己烷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (F) 480、(G) 500、(H) 520、(I) 540、(J)560 及(K) 600 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A2
附錄 A-3	激發 9F 正己烷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (A) 440、(B) 450、(C) 460、(D) 470 及(E) 480 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A3
附錄 A-4	激發 9F 正己烷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (F) 490、(G) 500、(H) 510、(I) 520 及(J) 530 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A4
附錄 A-5	激發 9F 正己烷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (K) 540、(L) 550、(M) 560、(N) 580 及(O) 600 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A5
附錄 A-6	激發 9F 二甲基亞砷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (A) 470、(B) 480、(C) 490、(D) 500、(E) 510 及(F) 520 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。....	A6
附錄 A-7	激發 9F 二甲基亞砷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (G) 530、(H) 540、(I) 550、(J) 560、(K) 570 及(L) 580 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。..	A7
附錄 A-8	激發 9F 二甲基亞砷溶液( $C_M = 2 \times 10^{-3} M$ )，螢光波長為 (M) 530、(N) 540、(O) 550、(P) 560、(Q) 570 及(R) 580 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 405 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A8

附錄 A-9	激發 9F 乙腈溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為 (A) 470、(B) 480、(C) 490、(D) 500、(E) 510 及(F) 520 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A9
附錄 A-10	激發 9F 乙腈溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為 (G) 530、(H) 540、(I) 550、(J) 560、(K) 570 及(L) 580 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A10
附錄 A-11	激發 9F 乙腈溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為 (M) 590、(N) 600、(O) 610、(P) 620 及(Q) 630 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A11
附錄 A-12	激發 9F 乙腈溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為 (R) 640、(S) 650、(T) 660、(U) 680 及(V) 700 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A12
附錄 A-13	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-5} M$ )，螢光波長為 (A) 430、(B) 440、(C) 450、(D) 460、(E) 470 及(F) 480 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A13
附錄 A-14	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-5} M$ )，螢光波長為 (G) 490、(H) 500、(I) 510、(J) 520、(K) 530 及(L) 540 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。...	A14
附錄 A-15	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-5} M$ )，螢光波長為 (M) 550、(N) 560、(O) 580、(P) 600、(Q) 640 及(R) 680 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 375 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A15
附錄 A-16	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為 (A) 460、(B) 470、(C) 480、(D) 490 及(E) 500 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 435 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A16
附錄 A-17	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為 (F) 510、(G) 520、(H) 530、(I) 540 及(J) 550 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 435 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A17

附錄 A-18	激發 1-HOF 正己烷溶液( $C_M = 5 \times 10^{-4} M$ )，螢光波長為 (K) 560、(L) 570、(M) 580、(N) 600、(O) 640 及(P) 680 nm 的時間-解析螢光光譜。激發波長為 435 nm。圓圈為實驗值，實線為擬合結果，點線為兩者之差。.....	A18
附錄 B-1	9F 正己烷溶液之理論計算.....	B1
附錄 B-2	9F 二甲基亞碲溶液之理論計算.....	B8
附錄 B-3	1-HOF 正己烷溶液之理論計算.....	B15
附錄 B-4	1-HOF-b 正己烷溶液之理論計算.....	B22
附錄 B-5	2,7-DMVECz 之理論計算.....	B24
附錄 B-6	3,6-DMVECz 之理論計算.....	B38
附錄 C-1	分子結構.....	C1

