

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2019.03.020

1-甲基-酰胺基蒽醌中分子内电荷转移的理论研究

刘文芳¹, 郭玉玮¹, 尹晓芬², 要飞虎²

(1. 包头师范学院化学学院, 包头 014030; 2. 太原师范学院附属中学, 太原 030000)

摘要: 本文采用密度泛函理论(DFT)和含时密度泛函理论(TD-DFT)对1-甲基-酰胺基蒽醌(MAAQ)的基态和激发态性质做了一系列计算研究. 在基态, MAAQ中酰胺基与蒽醌分子是共平面的, 并且酰胺基和蒽醌分子之间形成了一个分子内氢键 $C=O \cdots H-N$. $S_0 \rightarrow S_1$ 的跃迁属于一个明显的 $\pi \rightarrow \pi^*$ 特性. 在第一单重激发态, MAAQ具有两个稳定结构(平面构型 nMAAQ和扭曲的构型 tMAAQ). 其中, nMAAQ是占优势的构象. 同时, 在MAAQ的溶剂中, 观察不到 tMAAQ的发射光谱. 在激发态, MAAQ发生了扭曲的分子内电荷转移(TICT)过程. 在基态 MAAQ与 F^- 形成了一个分子间氢键 $F \cdots H-N$, 而激发态 MAAQ- F^- 复合物发生了激发态分子间质子转移现象.

关键词: 含时密度泛函; 酰胺基蒽醌; 分子内电荷转移

中图分类号: O641.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2019)03-0500-07

A theoretical study on the intramolecular charge-transfer of 1-methylamideanthraquinone

LIU Wen-Fang¹, GUO Yu-Wei¹, YIN Xiao-Fen², YAO Fei-Hu²

(1. Department of Chemistry, Baotou Normal College, Baotou 014030, China;

2. High School attached to Taiyuan Normal University, Taiyuan 030000, China)

Abstract: The ground states and excitation states of 1-methylamideanthraquinone (MAAQ) are studied by using density functional theory (DFT) combined with time-dependent density functional theory. In the S_0 state of MAAQ, amide group is coplanar with anthraquinone, and an intramolecular hydrogen bond $C=O \cdots H-N$ is formed. The $S_0 \rightarrow S_1$ transition belongs to $\pi \rightarrow \pi^*$. Two stable structures (planar nMAAQ and twisted tMAAQ) have been obtained in the S_1 state of MAAQ, nMAAQ is the dominant conformation in the S_1 state of MAAQ and the emission spectra of tMAAQ is not observed in the solution of MAAQ. In the S_1 state, twisted intramolecular charge transfer (TICT) process occurs in MAAQ. An intermolecular hydrogen bond $F \cdots H-N$ is formed in the S_0 state, and ES IPT happens in the S_1 state for MAAQ- F^- .

Keywords: Time-dependent density functional theory; Amideanthraquinone; Intramolecular charge transfer

收稿日期: 2018-01-21

基金项目: 内蒙古自治区高等学校科学研究资助项目(NJZY202); 校内青年基金资助项目(BSYKJ2013-26)

作者简介: 刘文芳(1986-), 硕士, 从事物理化学计算及配合物的合成研究.

通讯作者: 要飞虎. E-mail: qiy017@163.com

1 引言

蒽醌作为一个重要的有机发色团非常值得研究,其在紫外可见范围内有很强的吸收峰,并且显示出高效的系间窜越^[1-3]. 蒽醌及其衍生物也是许多领域中基本结构单元,如在染料工业^[4, 5]、摄影化学^[6]、橡胶、塑料、油脂、印刷、造纸、食品、医药^[7]等领域都有广泛的应用. 但是蒽醌衍生物最有影响力的应用是在光化学和光物理领域^[8-10]. 因此,蒽醌及其衍生物的光化学和光物理特性引起人们的广泛兴趣.

蒽醌衍生物作为一个重要的发色团广泛的应用于荧光传感器^[11-13]. 人们认为许多蒽醌衍生物检测 F^- 的信号传递机理可以用激发态分子内质子转移 (ESIPT) 来解释^[14-16]. Wang 等人的研究已经证明 ESIPT 确实能够在羟基蒽醌复合物中发生^[17]. 然而,对于氨基蒽醌作为多数 F^- 荧光传感器信号单元的 ESIPT 现象还没有研究过.

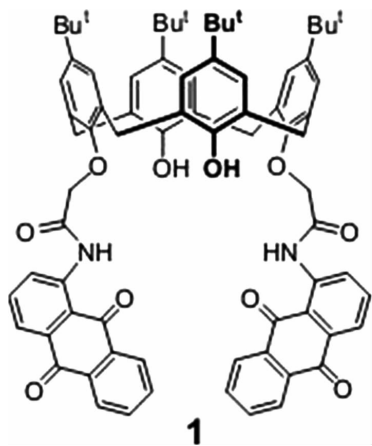


图 1 传感器 1 的结构

Fig. 1 The structures of chemosensor 1

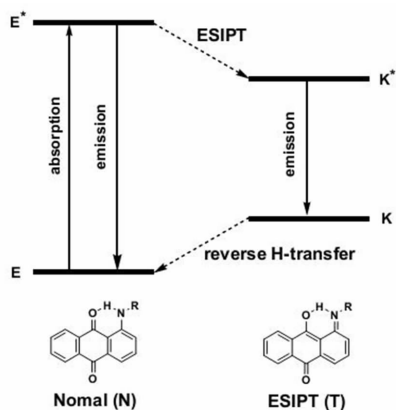


图 2 1-AAQ 的基态构型(N)和激发态构型(T)

Fig. 2 The ground state structure and excited state structure for 1-AAQ

Jung 和他的团队^[16]合成的荧光传感器 1(图 1),这种传感器是由 p-tert-butylcalix[4]arene 较低边缘连接着两个氨基蒽醌组成的. 他们通过测定传感器 1 和其他一些阴离子(如: F^- , Cl^- , Br^- , I^- , CH_3COO^- , $H_2PO_4^-$, HSO_4^- 和 OH^-)在不同溶剂中的吸收光谱和发射光谱,而对 F^- 有较高的选择性. 在甲苯和乙腈中,他们观察到一个双荧光,一个是正常结构发出的,另一个是斯托克斯位移互变异构体发出的,他们的发射谱分别在 515 和 560 nm. Jung 等人认为那个大的发射谱是由 ESIPT 现象引起的,如图 2 所示. 然而,在加入 F^- 离子后,只在 527 nm 处观察到一个荧光峰. 他们认为由于在传感器 1 中,1-AAQ 的 NH 与 C=O 之间能够形成分子内氢键,而 F^- 的加入阻止了分子内氢键的形成,所以只剩一个荧光峰了.

为了进一步研究芳香甲氨基复合物能否发生 TICT 过程,我们截取了荧光传感器 1 的两个信号单元中的一个,并且用一个甲基组取代了 p-tert-butylcalix[4]arene,我们把这个化合物叫做 1-甲基-氨基蒽醌,用 MAAQ 来表示. 我们优化了 MAAQ 的基态和激发态的构型,看 MAAQ 是否能发生 TICT 现象,同时,也计算了这些复合物在不同电子态的吸收光谱和发射光谱.

2 计算方法

密度泛函理论 (DFT) 和含时密度泛函理论 (TD-DFT) 已逐渐成为量子化学计算领域强有力的工具^[18-20]. 本文所有计算均采用 Gaussian09 程序^[21]进行. 运用密度泛函理论 (DFT),在 B3LYP/6-311++G(d, p)水平上,对 MAAQ 和 MAAQ- F^- 的基态几何结构进行全优化. 激发态的 MAAQ 和 MAAQ- F^- 的几何结构使用含时密度泛函理论 (TD-DFT) 方法,在 TD-B3LYP/6-311++G(d, p)水平下优化的. 所有的几何结构都是在没有对称性限制的条件下优化的. 所有结构的计算,以及吸收谱和发射谱电子跃迁的计算都是在甲苯溶剂效应下(与 Jung 等人在实验中使用的溶剂相同). 在 TD-DFT/B3LYP/6-311++G(d, p)水平上,理论研究了电子光谱的性质.

3 结果与讨论

3.1 MAAQ 的基态

优化后的基态 MAAQ 单体的几何结构如图 3 所示. 图中列出了一些重要原子的标号,并且选择

了一些主要的几何结构参数在表 1 中列出. 从表 1 中可以看出, O_6 和 H_7 之间的键长 $R_{O_6-H_7} = 1.768 \text{ \AA}$, 而在水分子中 $O-H$ 的共价键是 0.9575 \AA ^[22], O 原子和 H 原子的范德华半径和是 2.5 \AA ^[23], 这个距离在这两个数值之间. N_2 和 H_7 之间的键长 $R_{N_2-H_7} = 1.020 \text{ \AA}$, 这个距离比氨分子中 $N-H$ 键的距离 1.012 \AA 大 0.008 \AA . 所以, 我们可以说在基态的 MAAQ 中, 羰基氧和氨基基团之间能够形成分子内氢键 $C=O \cdots H-N$. 二面角 $D_{C_1-N_2-C_3-C_4} = 180.0^\circ$, 氨基角的和 ($C_1 N_2 C_3$, $C_1 N_2 H_7$ 和 $C_3 N_2 H_7$) $\sum CNC = 360.0^\circ$. 这些结果都表明 N 原子是 sp^2 杂化, 并且氨基和蒽醌部分呈现一个电子离域.

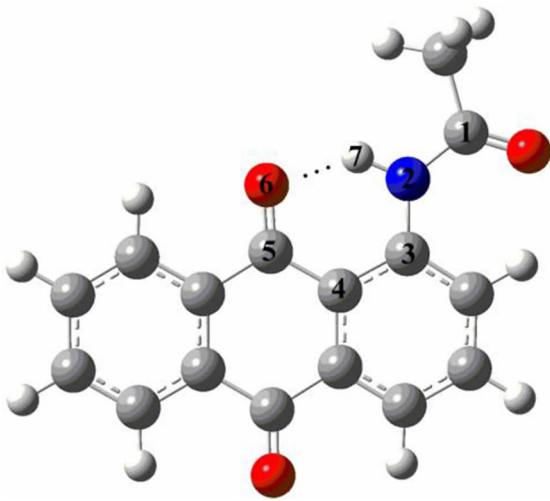


图 3 MAAQ 的基态优化结构和重要原子的标号
Fig. 3 The optimized geometric structures and atomic label of the ground state for MAAQ

我们也计算了 MAAQ 在甲苯溶液中的吸收光谱. 从表 2 中可以看到, 最大吸收光谱位于 429 nm 处, 振子强度是 0.1893 , 属于 $S_0 \rightarrow S_1$ 的跃迁. Diaz^[24] 的实验中, MAAQ 在四氯化碳溶液中的最大吸收峰位于 420 nm , 近似于我们的计算结果.

为了更深入地理解 MAAQ 电子跃迁的特性, 前线轨道理论分析如图 4 所示. 从表 2 中可以观察到, 从 $S_0 \rightarrow S_1$ 的跃迁明显与 $HOMO \rightarrow LUMO$ 的跃迁是相对应的, 属于 $\pi \rightarrow \pi^*$ 跃迁. $HOMO$ 轨道上的电子密度集中在分子右侧的环上, $LUMO$ 轨道上的电子密度分布在整个 MAAQ 的蒽醌分子环上. MAAQ 的 $HOMO \rightarrow LUMO$ 的跃迁显示出了一个分子内的电荷转移 (ICT) 特性.

3.2 MAAQ 的激发态

MAAQ 的最低激发态的几何结构是在 B3LYP/6-311++G(d, p) 水平下优化的, 激发态

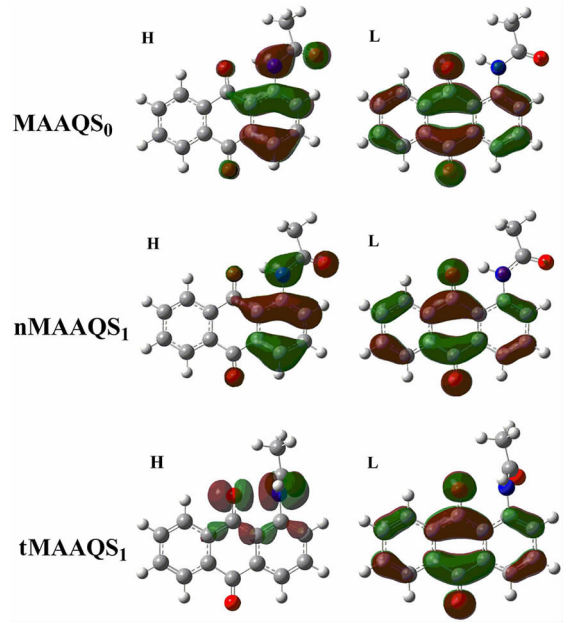


图 4 基态 MAAQ 的前线轨道理论分析
Fig. 4 Frontier MO of the ground state for MAAQ

的 MAAQ 的结构如图 5. 在第一激发态, MAAQ 获得了两个稳定的结构, 一个是正常结构, 如图 5a, 表示为 nMAAQ, 在这个结构中酰胺基团与蒽醌分子在一个平面上. 另一个结构是扭曲的结构, 如图 5b, 表示为 tMAAQ, 在这个结构中酰胺基团分布在蒽醌分子平面的两边. 并且计算结果表明平面结构 nMAAQ 要比扭曲结构 tMAAQ 稳定 0.105 eV . nMAAQ 和 tMAAQ 的一些主要的几何结构参数在表 1 中列出.

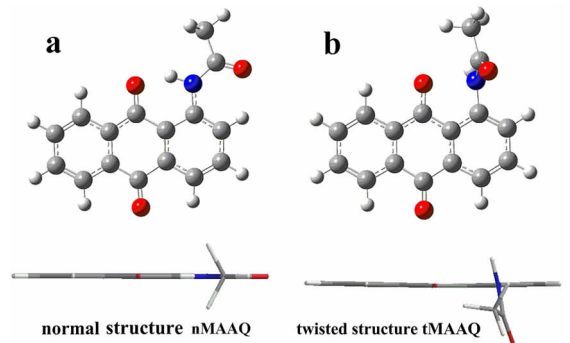


图 5 激发态的 MAAQ 的几何结构 (a 是平面结构, 用 nMAAQ 来表示, b 是扭曲的结构, 用 tMAAQ 来表示)

Fig. 5 The optimized geometric structures of MAAQ in the S_1 state

3.2.1 激发态 MAAQ 的平面结构 nMAAQ 从表 1 中发现在激发态, O_6 和 H_7 的键长 $R_{O_6-H_7} = 1.625 \text{ \AA}$, N_2 和 H_7 的键长 $R_{N_2-H_7} = 1.049 \text{ \AA}$. 将 MAAQ 的基态结构和激发态结构做比较, 发现 O_6

$-H_7$ 距离 $R_{O_6-H_7}$ 激发态比基态短 0.143 \AA , 而 N_2-H_7 距离 $R_{N_2-H_7}$ 激发态比基态长 0.030 \AA , 这个结果表明在激发态分子内氢键 $C=O \cdots H-N$ 加强. 氨基角的和仍然是 360.0° , 所以 N 原子与基态一样, 还是 sp^2 杂化, 在氨基和蒽醌之间整个分子仍然显示出电子离域.

我们计算了 MAAQ 平面结构的在甲苯溶液

中的发射光谱, 从表 2 中可以看到, 计算出的发射光谱是 523 nm , 这个结果与 Diaz^[24] 在正己烷中的实验结果 500 nm 接近, 由于氢键增强能够观察到一个大的斯托克斯位移 (94 nm). 从图 6 中观察到, nMAAQ 的前线轨道理论分析表明 MAAQ 激发态平面结构的电子特性与基态的相同, $S_1 \rightarrow S_0$ 的跃迁都是一个明显的 $\pi \rightarrow \pi^*$ 的跃迁.

表 1 基态和激发态 MAAQ 分子单体和它的 F^- 复合物一些主要的几何参数

Tab. 1 The geometric parameters of the ground state and excited state for MAAQ and MAAQ- F^- (in \AA)

States	R(\AA)							A($^\circ$)			D($^\circ$)		
	C ₁ -N ₂	N ₂ -C ₃	N ₂ -O ₆	C ₅ -O ₆	O ₆ -H ₇	N ₂ -H ₇	C ₁ -N ₂ -C ₃	C ₁ -N ₂ -H ₇	H ₇ -N ₂ -C ₃	Σ CNC ^a	N ₂ -H ₇ -O ₆	C ₁ -N ₂ -C ₃	
MAAQ	S ₀	1.382	1.394	2.626	1.236	1.768	1.019	129.6	117.5	112.9	360.0	139.3	180.0
nMAAQ	S ₁	1.406	1.368	2.569	1.262	1.625	1.049	130.2	118.9	110.9	360.0	147.1	180.0
tMAAQ	S ₁	1.411	1.428	2.301	1.288	---	1.013	124.0	117.6	118.1	359.7	---	102.9
MAAQ- F^-	S ₀	1.358	1.390	---	1.219	---	1.154	124.4	118.3	116.6	359.3	---	150.4
MAAQ- F^-	S ₁	1.388	1.420	---	1.264	---	1.557	118.4	120.3	119.8	358.5	---	99.7

^a Σ CNC 表示三个氨基角 ($H_3-N_4-C_5$, $H_3-N_4-H_7$ 和 $C_5-N_4-H_7$)

3.2.2 激发态 MAAQ 的扭曲结构 tMAAQ

tMAAQ 的几何构型在氨基基团和蒽醌平面之间有个扭曲的 102.9° 的角 (见表 1). 分子内氢键 $C=O \cdots H-N$ 被破坏. 此现象导致 N_2-H_7 键长从 nMAAQ 中的 1.049 \AA 缩短到了 tMAAQ 中的 1.013 \AA . 氨基和蒽醌分子之间的电子离域被阻止, 并且, 这个结果导致 N_2-C_3 键长从 1.368 \AA 增长到了 1.428 \AA . 而氨基角的和仍然接近 360° , N 原子与在 nMAAQ 中相同仍然是 sp^2 杂化.

从表 2 中可以看到, tMAAQ 的发射光谱出现在 774 nm . 而观察到的这个荧光发射并没有在 Diaz^[24] 的试验中报道出来, 这是因为在能量上 nMAAQ 的能量低于 tMAAQ, 所以在实验中激发态的 MAAQ 平面构型的荧光峰占主要优势. 然而, 因为其它单元影响激发态酰胺蒽醌的构型, 带有两个酰胺蒽醌作为信号基团的传感器 1^[16] 的双荧光被观察到.

表 2 计算的基态 MAAQ 和 MAAQ- F^- 的吸收峰, 激发态的 nMAAQ 和 tMAAQ 的发射峰 (括号内是振子强度)

Tab. 2 The calculated absorption spectra of MAAQ and MAAQ- F^- , emission spectra of nMAAQ and tMAAQ (oscillator strengths f)

Absorption ($S_0 \rightarrow S_1$)		Emission ($S_1 \rightarrow S_0$)	
MAAQ	MAAQ- F^-	nMAAQ	tMAAQ
429	520	523	774
(0.1893)	(0.0520)	(0.1760)	(0.0011)
H \rightarrow L	H \rightarrow L	H \rightarrow L	H \rightarrow L
(98%)	(95%)	(99%)	(96%)

从图 6 中能够明显的看到, 对于 tMAAQ 电子从酰胺分子转移到了蒽醌分子. 所以, 在 S_1 态, MAAQ 发生了 TICT 过程.

我们试着优化激发态的 MAAQ 发生 ESIPT 现象后的几何构型, 但是没有得到稳定的 ESIPT 构造. 为了证实 MAAQ 是否确实能发生 ESIPT 现象, 我们做了势能曲线的扫描. 通过改变 N_2-H_7

的距离从 0.70 \AA 到 1.90 \AA , 并且保持其它的原子不变. MAAQ 基态和激发态的势能曲线扫描图如图 7 中所示. 随着 N_2-H_7 键长的增长, 在基态和激发态的势能曲线上只有一个最小值点. 在这个最低点, 基态 N_2-H_7 的距离是 1.02 \AA , 这正是优化后基态稳定结构的 N-H 共价键的距离, 而激发态的 N_2-H_7 距离是 1.05 \AA , 这也正是优化后激

发态稳定结构时的 N-H 共价键距离. 这个结论进一步证明了 MAAQ 不能发生 ESIPT 现象.

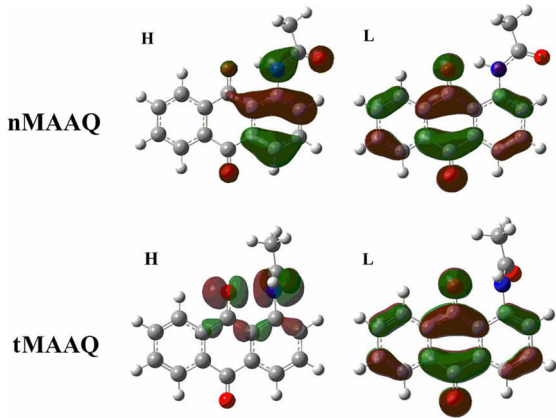


图 6 激发态 MAAQ 的前线轨道理论分析(a 是平面结构, 用 nMAAQ 来表示, b 是扭曲的结构, 用 tMAAQ 来表示)

Fig. 6 Frontier MO of MAAQ in the S_1 state

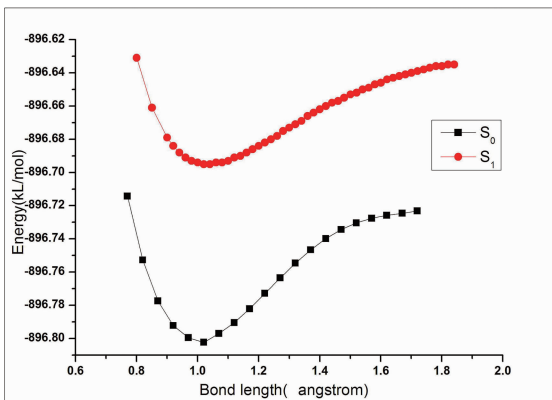


图 7 基态和激发态的 MAAQ 的势能面扫描图, 横坐标是 N-H 的距离(a 是平面结构, 用 nMAAQ 来表示, b 是扭曲的结构, 用 tMAAQ 来表示)

Fig. 7 Potential energy surfaces of the ground state and excited state for MAAQ, horizontal axis is the distance of N-H

3.3 MAAQ-F⁻ 离子复合物

我们计算了基态和激发态 MAAQ-F⁻ 复合物的几何结构. 从图 8 中可以看到, 随着 F⁻ 的加入, 分子的平面性被破坏了. 由于 F⁻ 有较高的电负性, 基态的 MAAQ-F⁻ 中找到了一个强的分子间氢键. N-H 键之间的距离是 1.154 Å, 这个距离比基态 MAAQ 中的 N-H 键的距离长 0.135 Å (见表 1), H-F 距离是 1.294 Å, 酰胺基和蒽醌分子之间的二面角是 150.4°.

对于 MAAQ-F⁻, 最大的吸收波长位于 520 nm 并且有一个比较大的振子强度 0.0520, 与

MAAQ 相比红移了 91 nm. 因此, 由于 MAAQ 分子 $S_0 \rightarrow S_1$ 的电子跃迁, MAAQ 和 F⁻ 之间的分子间氢键显示了一个相当大的红移, 表明 MAAQ 对 F⁻ 有很好的识别性.

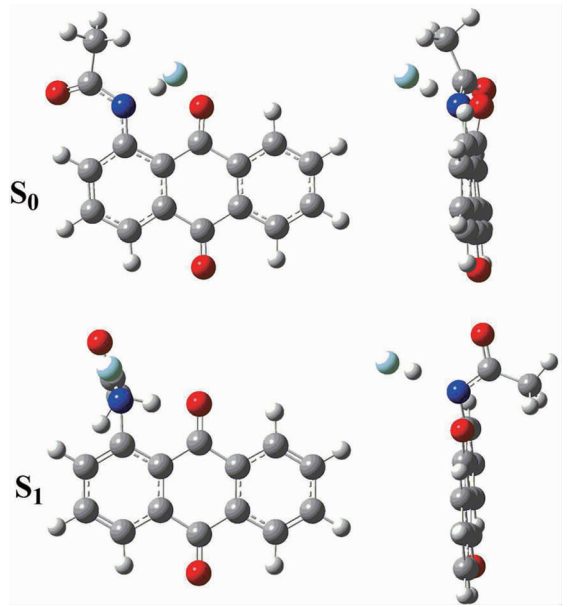


图 8 基态和激发态的 MAAQ-F⁻ 复合物的几何构形(a 是平面结构, 用 nMAAQ 来表示, b 是扭曲的结构, 用 tMAAQ 来表示)

Fig. 8 The geometric structures of the ground state and excited state for MAAQ-F⁻

由图 8 可以看到, 激发态的 MAAQ-F⁻ 只得一种扭曲的结构, 并且, 酰胺基和蒽醌分子之间的二面角是 99.7°. 正如表 1 中所示, 激发态的 MAAQ-F⁻ 复合物 N-H 之间的键长是 1.557 Å, 而计算出的复合物中的 H-F 距离为 0.988 Å, 这个距离非常接近 HF 分子中 H-F 之间的距离 0.9169 Å^[22]. 所以可以说激发态的 MAAQ-F⁻ 发生了质子转移, 氢原子从酰胺基转移到了 F⁻.

总之, F⁻ 的引入使平面结构的分子逐渐被破坏, 而扭曲的结构却仍然存在于激发态的 MAAQ-F⁻ 复合物. 根据 Jung 和他的同事做的实验得知^[16], 传感器 1 的发射光谱仍然出现在 515 nm, 而 560 nm 处的发射波长消失. 因此, 我们指定 560 nm 处的发射峰是平面结构酰胺蒽醌的, 而 515 nm 处的发射峰是扭曲结构的酰胺蒽醌的.

4 总 结

运用 DFT 和 TD-DFT 方法, 在 6-311++G(d, p) 基组下, 对 MAAQ 进行了一系列理论计算. 对于基态的 MAAQ, 酰胺基与蒽醌部分共平面, 并

且羰基氧和氨基氢之间形成了一个分子内的氢键 $C=O \cdots H-N$, 它的第一吸收峰位于 429 nm, 且伴随着一个 $\pi \rightarrow \pi^*$ 的电子跃迁。

激发态的 MAAQ 有两个稳定构形, 分别是平面的结构 (nMAAQ) 和扭曲的结构 (tMAAQ)。nMAAQ 结构的能量比 tMAAQ 结构的能量低 0.105 eV。所以在激发态的 MAAQ 中, nMAAQ 的结构占显著的优势, 并且在 MAAQ 的溶剂中观察不到 tMAAQ 的发射波长。在激发态 nMAAQ 的平面结构中, 分子内氢键 $C=O \cdots H-N$ 增强。此外, 在 nMAAQ 中, 观察到一个大的斯托克斯位移 (94 nm)。另外, tMAAQ 有一个明显的分子内的电荷转移特性, 而且激发态的 MAAQ 发生 TICT 过程。在我们的工作中, 激发态的 MAAQ 不能发生 ESIPT 过程。

随着 F^- 的加入, MAAQ 的平面构形被破坏, 并且无论是基态还是激发态的 $MAAQ-F^-$, 只得一种扭曲的构形。MAAQ- F^- 复合物在基态形成了一个分子间氢键 $F \cdots H-N$, 相对于 MAAQ 的第一吸收峰, 显示了一个相当大的红移。此外, 在激发态还观察到 MAAQ 上的酰胺基和 F^- 离子之间的激发态的分子内质子转移。

参考文献:

- [1] Zhu L Y, Khairutdinov R F, Cape J L. Photoregulated transmembrane charge separation by linked spiropyran-anthraquinone molecules [J]. *J Am Chem Soc*, 2005, 128: 825.
- [2] Gouloumis A, González-Rodríguez D, Vázquez P. Control over charge separation in phthalocyanine-anthraquinone conjugates as a function of the aggregation status [J]. *J Am Chem Soc*, 2006, 128: 12674.
- [3] Ren M G, Bi N M, Mao M. 2-(1'-Hydroxyethyl)-anthraquinone as a photolabile protecting group for carboxylic acids [J]. *J Photochem Photobiol A: Chem*, 2009, 204: 13.
- [4] Griffiths J. Colour and constitution of organic molecules [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 1982: 185.
- [5] Sun J, Lu H Y, Du L L. Anodic oxidation of anthraquinone dye alizarin red S at Ti/BDD electrodes [J]. *Appl Surf Sci*, 2011, 257: 6667.
- [6] Kim S H, Choi H S, Kim J. Novel optical/electrochemical selective 1,2,3-triazole ring-appended chemosensor for the Al^{3+} ion [J]. *Org Lett*, 2010, 12: 560.
- [7] Lown J W. Discovery and development of anthracycline antitumour antibiotics [J]. *Chem Soc Rev* 1993, 22: 165.
- [8] Ferreiro M L, Rodríguez-Otero J. Ab initio study of the intramolecular proton transfer in dihydroxyanthraquinones [J]. *J Mol Struct: Theochem*, 2001, 542: 63.
- [9] Jacquemin D, Preat J, Charlot M. Theoretical investigation of substituted anthraquinone dyes [J]. *J Chem Phys*, 2004, 121: 1736.
- [10] Chailap B, Tuntulani T. Optical and electrochemical properties of heteroditopic ion receptors derived from crown ether-based calix [4]arene with amidanthraquinone pendants [J]. *Org Biomol Chem*, 2012, 10: 3617.
- [11] Zhang Y J, He X P, Hu M. Highly optically selective and electrochemically active chemosensor for copper (II) based on triazole-linked glucosyl anthraquinone [J]. *Dyes Pigments*, 2011, 88: 391.
- [12] Lin Y S, Tu G M, Lin C Y. Colorimetric anion chemosensors based on anthraquinone: naked-eye detection of isomeric dicarboxylate and tricarboxylate anions [J]. *New J Chem*, 2009, 33: 860.
- [13] Kim H J, Kim S H, Kim J H. ICT-based Cu(II)-sensing 9, 10-anthraquinonecalix [4] crown [J]. *Tetrahedron Lett*, 2009, 50: 2782.
- [14] Wu F Y, Hu M H, Wu Y M. Fluoride-selective colorimetric sensor based on thiourea binding site and anthraquinone reporter [J]. *Spectrochimica Acta Part A*, 2006, 65: 633.
- [15] Peng X, Wu Y, Fan J. Colorimetric and ratiometric fluorescence sensing of fluoride: tuning selectivity in proton transfer [J]. *J Org Chem*, 2005, 70: 10524.
- [16] Jung H, Kim H, Vicens J. A new fluorescent chemosensor for F^- based on inhibition of excited-state intramolecular proton transfer [J]. *Tetrahedron Lett*, 2009, 50: 983.
- [17] Wang D P, Chen S G, Chen D Z. Theoretical study on the trihydroxy-anthraquinone tautomerism in the ground and excited states [J]. *J Mol Struct: Theochem*, 2003, 637: 129.
- [18] 王青, 王帅, 戴剑锋, 等. 同主族 Si/C 共掺杂 TiO_2 可见光区光催化性能的第一性原理计算 [J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2017, 54: 135.
- [19] 孙婷婷, 黄菊, 何伟平, 等. 诺氟沙星的密度泛函研究 [J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2017, 54: 1049.

- [20] 郑妍,陈晓,刘柳斜,等. 儿茶素与脱氧腺苷相互作用的理论研究 [J]. 原子与分子物理学报, 2018, 35: 891.
- [21] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 09, Revision C.01 [CP]. Wallingford C T: Gaussian, Inc., 2010.
- [22] Lide, D R. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th ed [M]. Cleveland: CRC Press, 2004.
- [23] Pauling L. The nature of the chemical bond, 3rd ed [M]. New York: Cornell University Press, 1980.
- [24] Diaz A N. Absorption and emission spectroscopy and photochemistry of 1, 10-anthraquinone derivatives: a review [J]. J Photochem Photobiol A, 1990, 53: 141.

引用本文格式:

中文: 刘文芳, 郭玉玮, 尹晓芬. 1-甲基-酰胺基蒽醌中分子内电荷转移的理论研究 [J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2019, 56: 500.

英文: Liu W F, Guo Y W, Yin X F. A theoretical study on the intramolecular charge-transfer of 1-methylamideanthraquinone [J]. J Sichuan Univ: Nat Sci Ed, Year, 2019, 56: 500.