

2-丁炔醇($\text{H}_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{CH}_2\text{OH}$)理論光譜計算

姚志憲、張嘉麟*

科學教育與應用學系

摘要

本研究以密度泛函理論的B3LYP、PBE0、 ω B97XD及APFD方法，搭配aug-cc-pVTZ基組，計算2-丁炔醇及其陽離子之平衡結構和振動頻率，再以本研究室新開發之內座標方法計算法蘭克-康登因子，模擬2-丁炔醇形成陽離子的光電子光譜，將數據整理後可得分子振動資訊和光譜圖數據，並與實驗光譜進行比較。結果發現理論光譜與實驗光譜在低能量區吻合，而在高能量區推測會與離子第一激發態的訊號重疊。

研究方法

- 計算分子平衡結構與振動頻率：B3LYP、PBE0、 ω B97XD及APFD搭配aug-cc-pVTZ基組。
- 計算法蘭克-康登因子：諧和與非諧和振子混成模型

結果與討論

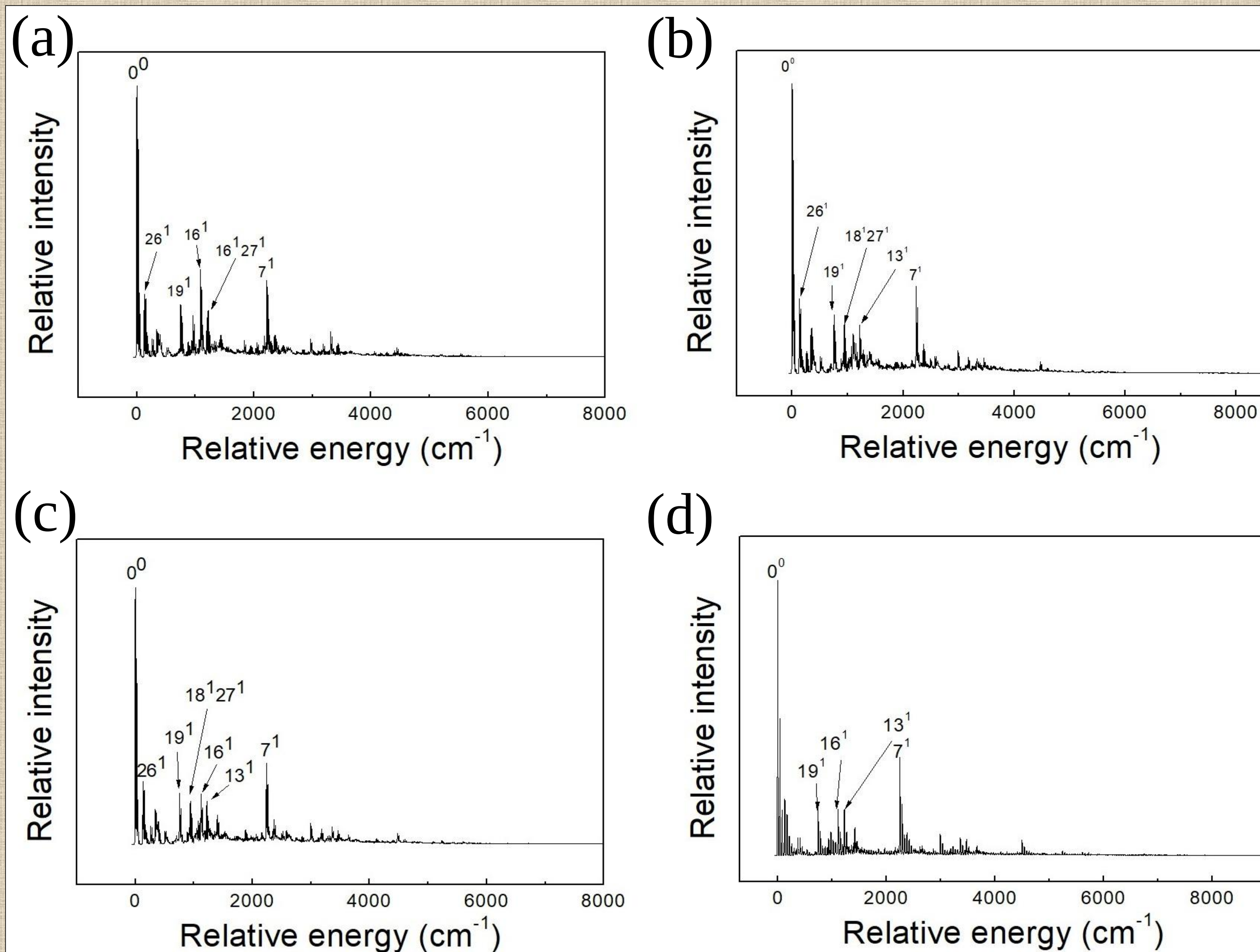


圖1. B3LYP(a)、APFD(b)、PBE0(c)、 ω B97xd(d)模擬的丁炔醇光電子光譜

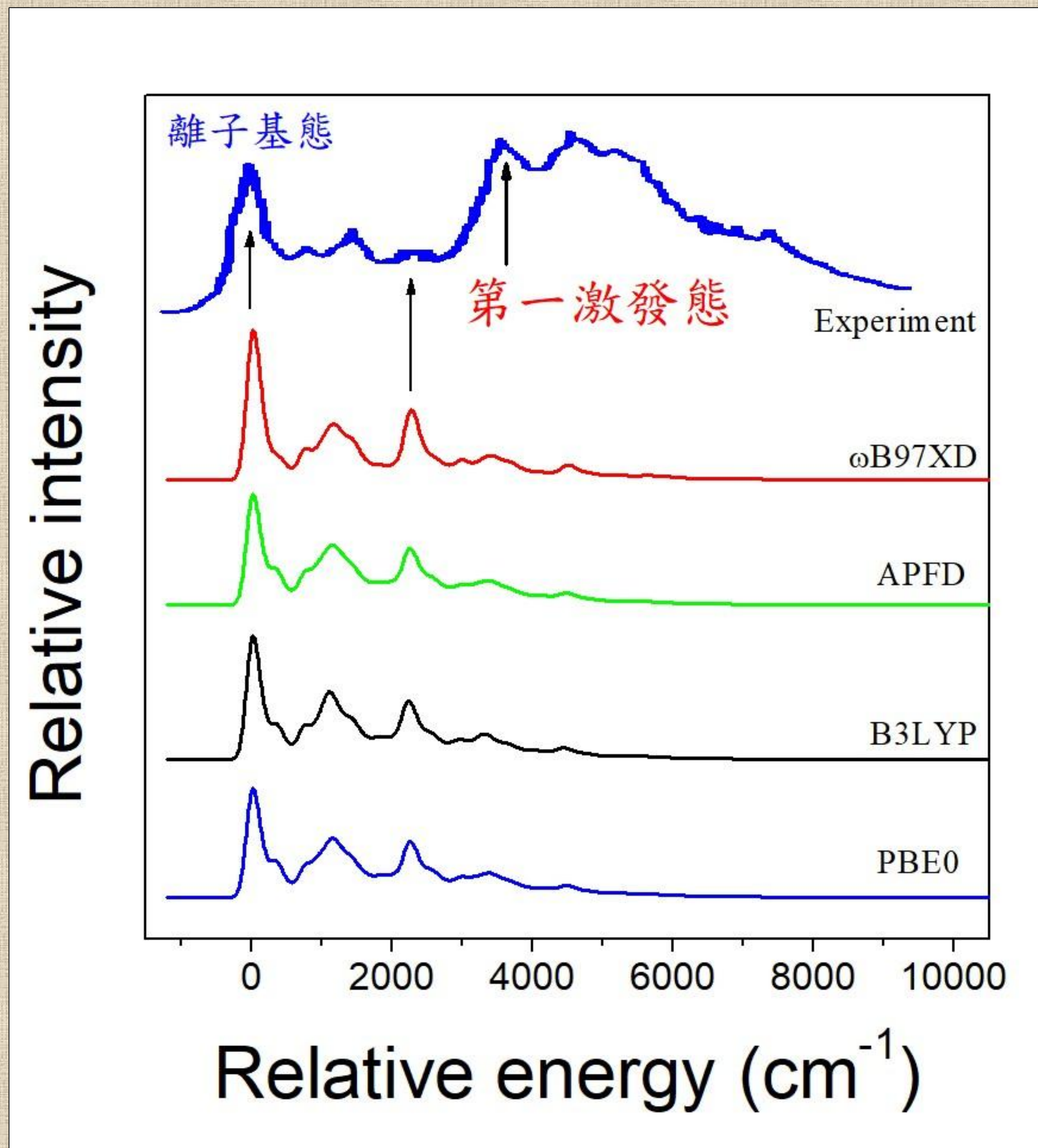


圖2.理論光譜和實驗光譜比對

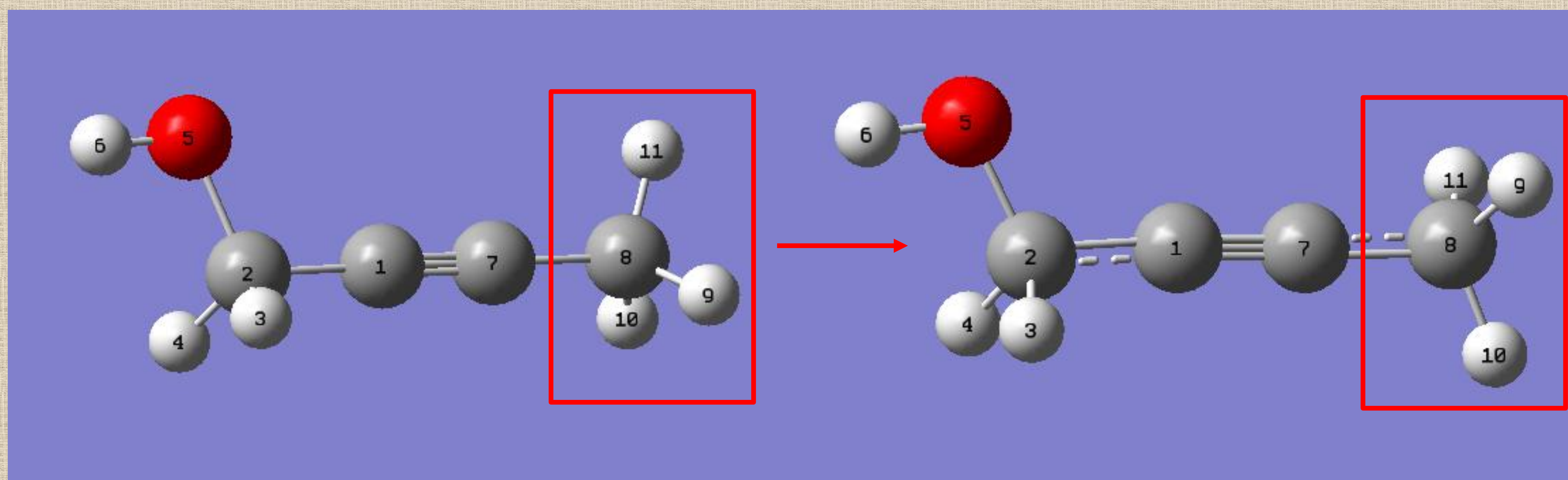


圖3.甲基部分旋轉

結論

- 模擬的2-丁炔醇光電子光譜與實驗光譜相符
- 本研究開發的內座標法計算法蘭克-康登因子，可成為研究理論光譜的新工具

參考文獻

1. Chang, J.-L.; Huang, C.-H.; Chen, S.-C.; Yin, T.-H.; Chen, Y.-T., An analytical approach for computing Franck-Condon integrals of harmonic oscillators with arbitrary dimensions. *Journal of Computational Chemistry* **2013**, *34*, 757-765.
2. Chang, J.-L.; Chen, H.-Y.; Huang, Y.-J., Reassignment of the Photoelectron Spectrum of Methylketene Using a Hybrid Model of Harmonic and Anharmonic Oscillators to Compute Franck-Condon Factors. *ACS Omega* **2023**, *8*, 40685-40694.
3. The He(I) photoelectron spectra of 2-butyne and related oxyalkynes D. Klapstein and R.T. O'Brien *Canadian Journal of Chemistry* **1988** Vol. 66 Issue 1 Pages 143-148