

聚硅烷研究进展

(II) 聚硅烷的电子结构与电子光谱特性

曹 晴 陆 云* 薛 奇

(南京大学化学化工学院高分子系, 南京, 210093)

提要 聚硅烷的独特性质与其电子在主链上离域有密切关系, 本文就聚硅烷的电子结构及电子光谱特性的研究作一综述。

关键词 聚硅烷, 电子结构, 电子光谱, 热致变色

聚硅烷是一类主链完全由不间断硅原子组成的聚合物。对聚硅烷的研究曾因其不溶不熔而在低谷徘徊了近 50 年, 直到 70 年代中期 Wesson 及 Williams 制备了在加热后微溶的聚二甲基硅烷^[1], 才重又引起了人们的兴趣。近 20 年来, 随着各种聚硅烷新合成方法推出, 各种衍生物的涌现, 聚硅烷的开发应用日益深入广泛, 也涉及到高科技领域许多方面。为更好地了解聚硅烷的特殊性, 人们对其电子结构及电子光谱特性等作了深入研究, 本文就聚硅烷的电子结构、电子光谱特性等近期研究作一综述。

1 聚硅烷的紫外光谱

众所周知, 以碳为主链的大多数聚合物只有在含有共轭双键或芳基时才会近紫外区有强吸收。然而, 所有的聚硅烷在紫外区几乎均有强烈吸收, 这是聚硅烷引起人们兴趣的重要原因之一^[2,3]。

由表 1、2 可见, 烷基取代聚硅烷的紫外最大吸收波长 $\lambda_{\max}$ 大约在 300~325nm, 与取代基半径总和有近乎线性关系, 无论是均聚物还是共聚物均有很强的紫外吸收, 每个 Si-Si 键的摩尔吸收系数为 5000~10000, 吸收带较宽, 为 25~40nm, 也没有振动精细结构。硅主链上有芳基直接取代时, $\lambda_{\max}$ 会有 25~35nm 红移, 但在芳基与主链间有碳原子隔开时, 其吸收光谱又与烷基取代聚硅烷相似, 而二芳基取代聚硅

烷比单芳基取代物的 $\lambda_{\max}$ 红移近 50nm, 带宽也变得相当窄, 仅 10~15nm。这样大的红移如果仅归因于二芳基的电子结构显然是不合适的。有人认为这种红移可能主要是由于构象的影响, 二芳基取代聚硅烷链上存在很长的反式链段。Cotts 等曾以光散射法测得聚二对丁苯基硅烷反式链段的持续长度近似 10nm, 相当于 60 个单体组成^[4]。而相应的聚二己基硅烷的持续长度却只有 3nm。前者由于有较长的反式链段存在呈刚性结构, 因而有较长的持续长度。

表 1 典型均聚聚硅烷溶液的紫外吸收特性

	聚合物	$\lambda_{\max}/\text{nm}$	* ϵ/SiSi
1	($n\text{-PrSiMe}$) _n	306	5600
2	($n\text{-HexSiMe}$) _n	306	5700
3	($\text{PhC}_2\text{H}_4\text{SiMe}$) _n	303	9950
4	($n\text{-C}_{12}\text{H}_{25}\text{-SiMe}$) _n	309	5000
5	(cyclo-HexSiMe) _n	320	7390
6	($n\text{-HexSi}^i n\text{-Pr}$) _n	318	10600
7	($n\text{-BuSi}$) _n	314	8400
8	($n\text{-Hex}_2\text{Si}$) _n	317	9700
9	[($n\text{-C}_{14}\text{H}_{29}$) ₂ Si] _n	322	8400
10	($n\text{-HexSi}^i n\text{-C}_8\text{H}_{17}$) _n	318	8785
11	(PhSiMe) _n	341	9300
12	($p\text{-MeC}_6\text{H}_4\text{SiMe}$) _n	338	8600
13	($p\text{-MeOC}_6\text{H}_4\text{SiMe}$) _n	344	8180
14	[$p\text{-(}n\text{-C}_6\text{H}_{13}\text{OH)-C}_6\text{H}_4\text{SiMe}$] _n	354	5400
15	($\text{cyclo-C}_6\text{H}_5\text{C}_6\text{H}_4\text{SiMe}$) _n	352	4000
16	($\beta\text{-C}_{10}\text{H}_7\text{-SiMe}$) _n	350	2800

* 每摩尔 SiSi 键的吸收系数

* 通讯联系人

大多数聚硅烷衍生物的吸收光谱也与聚合度有关, λ_{max} 及摩尔吸收系数均随聚合物链长而增加, 但当聚合度达到 40~50 时即达到极限^[5] (如图 1 所示), 因而要比较不同分子量聚硅烷取代基的立体效应及电子效应时, 必须在分子量达到收敛时才合适, 这用下文提及的 Sandorfy 理论可得到满意的解释。

2 聚硅烷的电子结构及对紫外光谱的解释

用最简单成键轨道线性组合 (LCBO), Sandorfy C 模型(见图 2) 及自由电子理论 (FE) 已能成功地说明聚硅烷电子的离域特征了^[6~8]。而用全价电子半经验法^[9] 及全价电子 ab 从头计算^[10] 等又可进一步补充许多细节, 这些模型计算了多达 40 个硅原子的聚硅烷, 对硅链电子结构的描述基本上是一致的。

表 2 典型聚硅烷共聚物溶液的紫外吸收特性

$-(R^1R^2Si)_n(R^3R^4)_m-$				n/m	λ_{max} /nm
R^1	R^2	R^3	R^4		
1	Me	Me	<i>n</i> -Hex	1.52	303
2	Me	Me	Ph	1.51	330
3	Me	Me	Ph	1.13	351
4	Me	Me	<i>p</i> -BuC ₆ H ₄	1.0	354
5	Me	Me	<i>p</i> -BuOC ₆ H ₄	1.0	357
6	Me	cyclo-Hex	PhC ₂ H ₄	1.49	310
7	Me	cyclo-Hex	<i>p</i> -MePh	1.77	338
8	Me	PhC ₂ H ₄	Ph	1.77	326
9	Me	cyclo-Hex	<i>t</i> -Bu	1.0	312
10	Me	Me	TMS	1.0	295
11	Me	Ph	TMS	1.0	308
12	Me	Me	α -C ₁₀ H ₇	0.6	300

TMS—三甲基硅烷基。

Sandorfy C 模型认为聚硅烷中每个硅原子以近似于 sp^3 杂化轨道与相邻硅原子 sp^3 轨道相互作用, 其共振积分为 β_{ic} , 表示相邻硅原子间电子云的重叠, 从而形成了 SiSi σ 键, 这样硅原子的 sp^3 轨道即分裂成强成键轨道 α_{Si} 键及强反键轨道 α_{Si}^* 。同一硅原子上的两个 sp^3 杂化

轨道也有相互作用, 可用共振积分 β_{gem} 表征此种相互作用, 由此造成分子轨道在整个硅主链上离域, 这种情况与人们熟知的多烯烃 π 电子系统很相近。Sandorfy C 法对 Si_nH_{2n+2} , $n \leq 5$ 时计算得到库仑积分 $\alpha = -8.6 \pm 0.07 \text{ eV}$; $\beta_{\text{vic}} = -1.9 \pm 0.10 \text{ eV}$, $\beta_{\text{gem}} = -1.67 \pm 0.02 \text{ eV}$ 。 $\beta_{\text{gem}}/\beta_{\text{vic}}$ 可表征离域的程度, 当比值为 0 时, 表示轨道完全定域; 当比值为 1 时, 表示轨道完全离域。多烯的比值为 0.76, 上述聚硅烷中此比值为 0.87, 可见聚硅烷中电子在整个硅链上离域更加完全, 使 SiSi 间距离几乎相等。

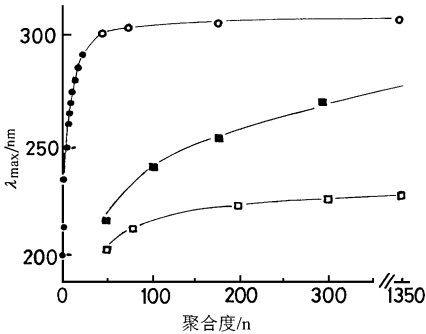


图 1 最大吸收波长与聚合度的关系

●—Me(Me₂Si)_nMe; ○—[(*n*-C₁₂H₂₅)(Me)Si]_n;
■—(PhSiMe)_n; □—[(*n*-C₁₂H₂₅)(Me)Si]_n

如果再考虑到硅原子与取代基间的相互作用, 即为 Sandorfy H 模型。每个硅原子的两个 sp^3 杂化轨道分别与取代基轨道相互作用, 形成成键的 α_{H} (或 α_{C}) 及反键的 α_{H}^* (或 α_{C}^*), 如图 3 所示。图中上部表示硅的 sp^3 轨道与氢的 $1s$ 轨道形成 α_{H} 及 α_{H}^* , 下面两行分别表示全反式聚硅烷硅原子与氢原子形成的成键轨道 α_{H} 及反键轨道 α_{H}^* , 一种以原子轨道表示, 另一种以杂化轨道表示。有两种对称性, 其一以 SiSi 平面为镜象对称即 σ 对称, 另一为以此平面为反对称即 π 对称。由图 3 可见, α_{H} 轨道大部分定域在 H 原子上, α_{H}^* 轨道大部分定域在 Si 原子上, 这是由于硅原子的电负性较氢原子 (或碳原子) 小, 这也使得 σ 对称或 π 对称的 α_{H} 轨道能量低, 远低于硅主链上 SiSi 键分子轨道。但由于对称性不适应, π 对称的 α_{H} 及 α_{H}^* 不能与硅

主键轨道组合,只有 σ 对称的 α_{SiH} 及 α_{SiH}^* 才能与其组合。

由于 SiSi 键最高成键轨道与 α_{SiH} 能量匹配性差,组合后影响很小,使 HOMO 能级几乎未变化,但最低已占有轨道受 α_{SiH} 的影响,能量上升,结果如图 2 所示, SiSi 键成键轨道能带压缩了,但重心却提高了。同样, SiSi 键的反键轨道,

能带展宽,重心下降。这就是 Sandorfy C 模型处理的结果。由节面模型同样可判断能级的高低。由图 2 可见,在成键轨道中,键的中间无节面,只是在硅原子上有节面,随着节面个数增加,能量也上升。而在反键轨道中,键的中部也有节面,同样随节面数增加,能量也上升。

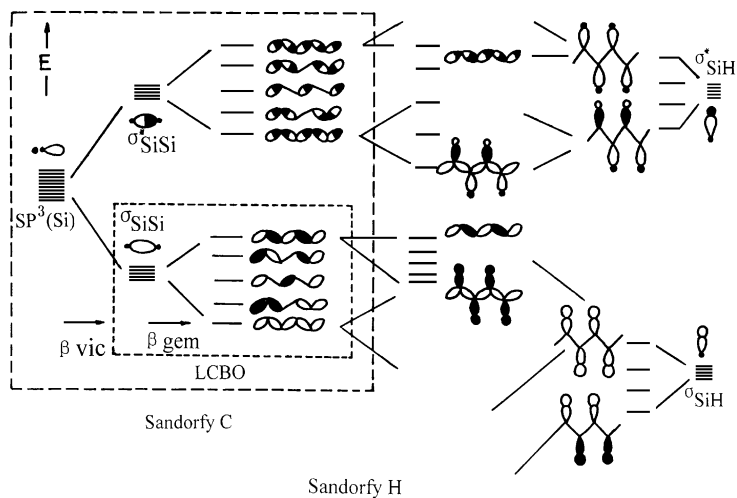


图 2 长链反式聚硅烷形成 σ 对称轨道示意图
左边为主键轨道,右边为 SiH 轨道,中间为相互作用结果

低聚聚硅烷在紫外长波区均有强吸收,由简单的电子结构就很容易理解了。从 σ 对称的 HOMO 跃迁有两种可能,一种是激发到 π 对称的 SiC 反键轨道,另一种激发到 σ 对称的 LUMO 轨道。

由 Sandorfy H 模型得知, HOMO 能量上升, LUMO 能量下降,使跃迁能下降,因而吸收波长增大。事实上聚硅烷电子激发态更加复杂,除了 $\alpha_i \rightarrow \alpha_i^*$ 跃迁外也可能有 $\alpha_i \rightarrow \alpha_j^*$ 跃迁,甚而有 Si 3d 轨道的特征^[11]。

聚硅烷溶液最大吸收波长受取代基影响很大,取代基可能通过电子结构直接影响,也可能通过构象间接影响。当聚硅烷侧链有芳基取代时,由于芳基的 π 电子与硅主链电子相互作用,使 HOMO 能量大大上升从而使跃迁能量进一步下降,引起较大的红移。对于烷基取代聚硅烷而言, λ_{max} 随着烷基增大而增加,小烷基取代的

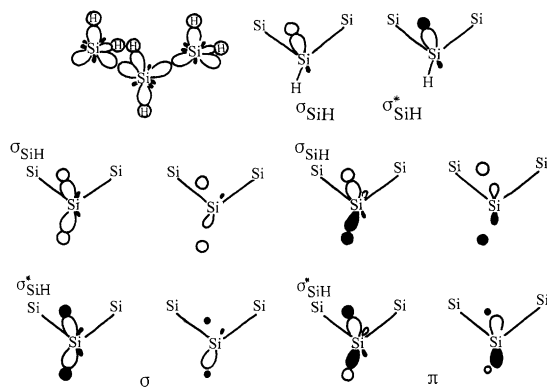


图 3 聚硅烷每个硅原子 α_{SiH} 及 α_{SiH}^* 两种对称性示意图

λ_{max} 约为 305nm, 而聚己甲基硅烷 λ_{max} 即为 326nm, 研究发现, 这种差别主要是由于链构象的差别引起, 烷基越大, 有利于形成更多比例的反式构象。表 3 给出了聚硅烷链上存在不同大

小的烷基时不同构象的相对能量^[12]。旁式构象 G^+G^+ 能量较全反式构象 TT 略低, 故可能为

表 3 不同大小烷基对不同构象相对能量的影响

构 象	Me(SiMe ₂) ₅ Me	Me[(n-C ₆ H ₁₃) ₂ Si] ₅ Me
G ⁺ G ⁺	0.0	3.0
G T	0.8	1.5
T T	0.9	0.0
G ⁺ G ⁻	38.4	/

螺旋形结构, 但当取代基体积大时, 全反式构象 TT 的能量却为最低。实际上聚硅烷链有一定柔性, 其旁式与反式构象达到一定平衡, 随着其链长增长, 全反式所占比例也增加, 使跃迁能下降, 但当链长增加一定值时, 跃迁能即趋于恒定, 因而 $\lambda_{\max}$ 及每个 Si-Si 键的摩尔吸收系数均随链长而增加, 但在链长达到一定值时即收敛。由此可见, 现有理论虽能较好定性解释聚硅烷的紫外吸收特性, 但还不够完善, 还不能定量描述构象对发色基团吸收波长及激发链段的几何松弛等的复杂影响。

3 聚硅烷的发射光谱

聚硅烷另一特性是能产生荧光及磷光发射^[2]。典型的聚二烷基取代硅烷的荧光激发峰与发射峰间有一定位移 (Stokes 位移), 通常为 15~30 nm, 而且发射峰要更窄一些 (见图 4)。但烷基取代的聚硅烷的 Stokes 位移很小, 约为 10 nm。而聚甲基 β -萘基硅烷及甲基 α -萘基硅烷与二甲基硅烷共聚物却有很宽的 Stokes 位移, 这是由于存在分子内受激体的缘故^[13]。

Allan 由理论计算证明自由分子极化引起 Stokes 位移, 并指出硅链发光性质与分子间相互作用有关^[14]。

一般聚硅烷的荧光发射光谱很窄, 缺乏振动精细结构, 这也表明其激发态是广泛离域的。荧光发射寿命很短, 常为 $75 \sim 200 \times 10^{-12} \text{ s}$ ^[9], 产生荧光的量子效率 Φ 也随激发波长而变化。通常 Φ 随 λ 而上升, 在短波区 Φ 为一平台, 如图 5 所示。Zeigler 认为这是由于在长波区至少

有两种互不联系的跃迁, 各有不同的量子效率 Φ , 而且在长波区激发链段有更广泛的离域、更强的振子强度, 因而有较高的量子效率^[13]。通常聚硅烷的荧光发射 Φ 较高, 为 0.1~0.7。但对有甲硅基取代的聚硅烷而言, 其 Φ 大大下降, 例如聚甲基(三甲基硅烷基)硅烷 Φ 仅为 0.026。Zeigler 等认为这是由于系统内光反应三重态交叉速率增大的缘故^[15]。实际上, 荧光发射还要复杂得多, 存在着许多竞争的过程, 并不是单纯一种原因导致 Φ 下降。

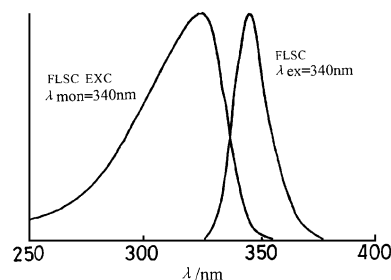


图 4 聚二正己基硅烷在三甲基戊烷溶液中室温下的荧光光谱 (FLSC) 及荧光激发光谱 (FLSC EXC)

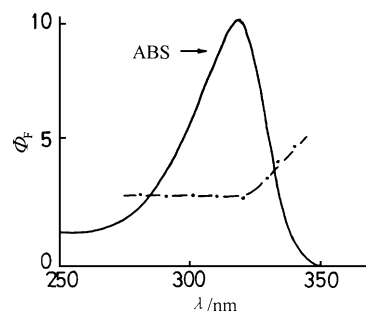


图 5 聚二正己基硅烷在 3-甲基戊烷溶液荧光量子效率与激发波长的关系 (ABS 表示荧光激发光谱吸收)

聚硅烷衍生物在刚性介质中还有弱而宽的磷光发射, 寿命长达 1~5 ms, 量子产率却很低, 仅为 10^{-4} , 有可分辨的振动结构^[2]。Harrah 等认为这表示它们有高度定域的三重态, 这也是造成光不稳定的原因^[13]。产生磷光的能量以外推法得到, 为 314~335 kJ/mol, 与 Si-Si 键离

解能相当,因而三重态与光化学裂解可能是互相竞争的过程。

4 聚硅烷紫外吸收的热致变色现象

聚硅烷电子光谱最奇特的性质是存在热致变色现象。Trefonas 把二烷基取代聚硅烷的饱和烃类溶液中的热致变色按取代基不同分为 3 种类型^[16]。第一类是高度不对称的无规聚合物,如聚正己基甲基硅烷溶液的紫外光谱在室温时 $\lambda_{\max}$ 为 306nm,冷却到 -17°C , $\lambda_{\max}$ 逐步红移至 330nm 左右(如图 6 所示),同时吸收峰也明显变窄。这与低温下反式链段比例增多是一致的。由于反式链段发色基团的跃迁能较低导致 $\lambda_{\max}$ 不断增大。第二种类型为有规整排列取代基的不对称聚硅烷,如聚环己基甲基硅烷、聚甲基苯基硅烷等,它们在冷却时 $\lambda_{\max}$ 非但不红移反而略有蓝移,这可能是由于主链上反式顺序断裂使其平均持续长度下降而引起的。第三种类型是对称的二烷基聚硅烷衍生物,随着温度下降发生突然的热致变色,报道的第一个有此特性结构的聚合物为聚二正己基硅烷^[17],其溶液的紫外光谱在温度下降时开始有连续缓慢的红移(见图 7),但达到某温度时由原先很宽的吸收带突然移至 354nm 成为很窄的吸收带,转变温度范围很窄,在烷烃溶剂中只有几度范围。但随着聚合物结构及溶剂不同,突变温度范围也可变得很宽,低于此转变温度时聚二正己基硅烷即很快沉淀。Zeigler 认为这是由于单分子螺旋形结构转变为棒状结构所致。

Trefonas 等认为这种吸收带的改变可能是由于分子链趋向反式或近反式构象引起,其中也包含有聚集效应的影响^[16]。Thorne 发现聚二正己基硅烷的紫外光谱在刚性介质中 77K 也会发生突变的红移与聚二正己基硅烷液态溶液中室温下的光谱很相似,但其发射寿命很短,而聚二正己基硅烷的固体悬浮液发射寿命却相当长,这说明热致变色可能是由单分子构象改变引起。然而也发现 77K 时其衰减曲线为非指数式,随冷却速率而变化,这说明可能有聚集现

象发生。

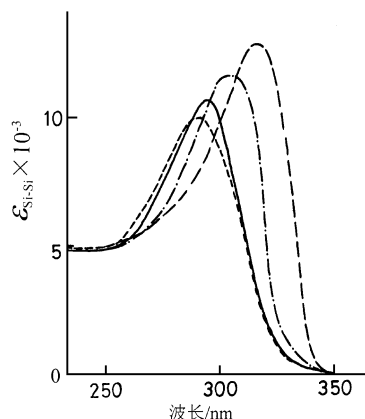


图 6 聚正己基甲基硅烷 0.0035% 异辛烷溶液的紫外光谱
(---) 92°C ; (····) 24°C ; (- · -) 17°C ;
(- - -) -67°C

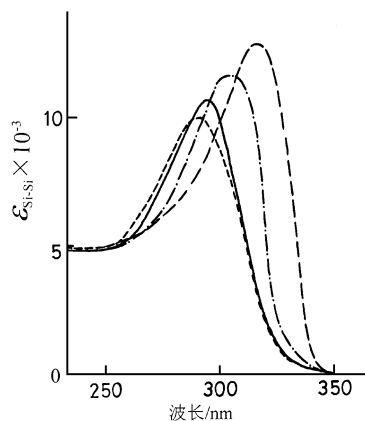


图 7 0.0045 聚二正己基硅烷己烷溶液的紫外光谱
(---) 56°C ; (- · -) 24°C ; (- · · ·) -23.5°C ;
(- - -) -24.2°C ; (----) -54.5°C

聚硅烷热致变色理论十分复杂,要清楚其机理,先要解决两个问题。一是此种变化是否的确是单分子过程,对此虽有争议但大致是肯定的答案。二是热致变色的推动力是什么。Schweitzer 提出,是极化驱动这种变化,由于聚合物在降低温度时,构象趋向具有更长的反式链段,聚合物与溶剂的诱导偶极矩之间范德华作用使其极化度增大,促使了热致变色^[18]。若

以 VD 表示聚合物为展开的全反式构象时离域的主链对溶剂-聚合物吸引作用的贡献, ϵ 为转动缺陷能由于旁式或近旁式构象扭曲引起的自由能增加, 则 VD/ϵ 比值可决定热致变色的类型。 VD/ϵ 值小即表示偶合弱, 发生连续缓慢的热致变色, 随着温度下降非平面缺陷也不断减少。当 VD/ϵ 值大时即为强偶合, 使聚合链拉直产生生长的全共轭链段, 此时即发生突变的热致变色。Chien-Hua Yuan 等合成了侧链有氧原子的聚[5-乙氧基苯基正丙基]硅烷(1)及聚[5-乙氧基苯基正己基]硅烷(2), 它们的线性侧链具有更大的柔性。它们与一般的聚二烷基硅烷不同, 可溶于异丙醇但不溶于甲醇, 温度下降时 $\sigma\sigma^*$ 吸收带渐有红移, 在低温下发生突变, 同时发生一级相变。聚合物(1), (2)不发生侧链结晶, (1)根本不发生晶相变化。这证实了 Schweitzer 的理论^[19]。

固态聚硅烷也会发生热致变色现象。聚二烷基硅烷如聚二丁基硅烷(PDBS)及聚二戊基硅烷(PDPS)溶液的热致变色现象与聚二己基硅烷溶液(PDHS)相同, 但在固态时它们并非反式构象而是 $7/3$ 螺旋形结构, 在转变温度(分别为 85 及 70°C) 以上时, 主链及侧链构象均为无序的, 到了转变温度即发生突变的热致变色, 但却没有 PDHS 那样的全反式构象, 其控制热致变色因素也不相同^[20]。

5 结束语

综上所述, 聚硅烷及其衍生物的电子光谱具有与一般聚合物不同的特性, 与其电子结构及构象又有密切关系, 因而通过对其电子结构及构象的研究可合理诠释电子光谱的本质, 而由电子光谱又可获得聚硅烷结构丰富的信息。但目前对聚硅烷电子光谱研究在许多方面还不够完善, 例如有关三重态及取代基效应、电子能量转移速率、激发态链段的几何松弛、溶液中磷光猝灭的定量分析、固态热致变色与结构的关

系等均有待深入研究, 随着这些问题的解决, 聚硅烷应用开发也必将获得进一步发展, 可以预期二十一世纪, 聚硅烷必将成为应用广泛的功能高分子材料中重要的一员。

6 参考文献

- 1 Wesson J P, Williams T C · J Polym Sci, Polym Chem Ed 1979, 17: 2833
- 2 Miller R D, Michl J · Chem Rev, 1989, 89: 1359
- 3 Miller R D, et al · Angew Chem, Inter Ed Eng, 1989, 28(12): 173
- 4 Cotts P M, Miller R D · Bull Am Phys Soc, 1988, 33(3): 656
- 5 Trefonas P, West R, Miller R D · J Polym Sci, Polym Lett Ed, 1983, 21: 823
- 6 Bock H, Ensslin W, Feher F, Freund R · J Am Soc, 1976, 98: 668
- 7 Herman A, Dreczewski B, Wojnowski W · Chem Phys, 1985, 98: 475
- 8 Herman A, Dreczewski B, Wojnowski W · J Organomet Chem, 1983, 251: 7
- 9 Klingensmith K A, Downing J W, Miller R D, Michl J · J Am Chem Soc, 1986, 108: 7438
- 10 Mintmire J W, Oritz J V · Macromolecules, 1988, 21: 1189
- 11 Wadsw C L · Organometallics, 1985, 4: 1664
- 12 Robert W, et al · J Organomet Chem, 1986, 300: 327
- 13 Harrah L A, Zeigler J M · Macromolecules, 1987, 20: 601
- 14 Allan G, et al · Phys Rev B: Condens S, Matter, 1993, 48(11): 7951
- 15 Michl J, Downing J W, et al · pure Appl Chem, 1988, 60: 959
- 16 Trefonas P, Danewood J R, West R · Organometallics, 1985, 4: 1318
- 17 Harrah L A, Zeigler J M · J Polym Sci, Polym Lett Ed, 1985, 23: 209
- 18 Schweitzer K S · Polym Prepr, 1986, 27(2): 354
- 19 Chien-Hua Yuan, Robert West · Macromolecules, 1993, 26: 2645
- 20 Frederic C Schilling, Lovinger A J, Zeigler J M, et al · Macromolecules, 1989, 22: 3055

(下转第 10 页)

- 34 Chua P S·Polym Compos, 1987, 8;308
- 35 Chua P S·SAMPE Q, 1987, 8;18
- 36 Chauchard J, Chabert B, Jeanne P, Nemoz G·Angew Makromol Chem, 1987, 154;23
- 37 Perret P, Gerard J F, Chabert B·CR Acad So Paris, 1987, 304(Serie II);569
- 38 Garton A, Dally J H, Stevenson W T K, Wiles D M·Polym Eng Sci, 1986, 24;2383
- 39 Perret P, Gerard J F, Chabert B, Dartus A, Hognut J·Comptes-Rendus des Sixiemes Journées Nationales sur les Composites, JNC6, Paris, 1988, 103
- 40 Harris B, Braddell O G, Almond D P, Lefebvre C, Verbist J·J Mater Sci, 1993, 28;3353
- 41 Landry G J T·Macromolecules, 1993, 26;3702
- 42 Huang H H, Wilkers G L, Carlson J G·Polymer, 1989, 30;2001
- 43 Huang H H, Orler B, Wilkers J G·Macromolecules, 1987, 20;1322
- 44 Carotenuto G, Nicolais L, Kuang X·Appl Comp Mater, 1996, 3;103

Analysis of Internal Friction Features and Structure for Polymer Blends and Composites

Zeng Hanmin, Rong Minzhi, Zhang Mingqiu

(Materials Science Institutes, Zhongshan University, Laboratory of Polymer Composites and Functional Materials, The State Education Commission of China, Guangzhou 510275)

Summary The paper represents the situation of internal friction researches for polymer blends and composites, and analyses specially the correlation between internal friction behavior and microstructure. It is found that both intermolecular interaction in polymer blends and composite interface interaction are reflected by internal friction features at molecular level, therefore, internal friction measurement is sensitive probe for characterizing supermolecular structure in polymer blend and composite interface microstructure. The intrival problem needed to be considered in the future includes the studying of internal friction mechanism, establishing appropriate model to describe the internal friction behavior and giving definite physical meaning for characteristic parameters.

Key words Polymer blends, Composites, Internal friction analysis, Structure features

(上接第 45 页)

Recent Progress in Study of Polysilane(2)

Electronic Structure and Electronic Spectra of Polysilane

Cao Qing, Lu Yun, Xue Qi

(Department of Polymer Science and Engineering, College of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University, Nanjing 210093)

Summary There is close relationship between unusual properties and the electron delocalization along backbone of polysilane. This review focuses on the recent studies of electron structure and electronic Spectra of polysilane.

Key words Polysilane, Electronic structure, Electronic spectra, Thermochromism