

光谱学与光谱分析

六种香豆素类染料荧光光谱的量子化学研究

张 姝¹, 谢永红², 谭英雄¹, 陈国力¹, 廖显威¹

1. 四川师范大学化学与材料科学学院, 四川 成都 610066

2. 内江师范学院化学与生命科学学院, 四川 内江 641000

收稿日期 2008-12-12 修回日期 2009-3-16 网络版发布日期 2009-12-1

摘要 采用量子化学半经验方法AM1对6种香豆素类染料的荧光光谱进行了理论研究。对各化合物优化后的构型作了振动分析, 均未出现虚频率。在此基础上, 采用单激发组态相互作用方法(CIS)计算荧光光谱, 所有计算结果与实验值基本吻合。

关键词 [香豆素类染料](#) [荧光光谱](#) [量子化学](#) [CIS](#)

分类号 [O657.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2009\)12-3323-04](#)

通讯作者:

张 姝 zhangshu1972@126.com

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(453KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“香豆素类染料”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [张 姝](#)

· [谢永红](#)

· [谭英雄](#)

· [陈国力](#)

· [廖显威](#)