

卟吩垂直激发态的理论研究方法的比较

任彦亮; 万坚; 刘俊军; 万洪文

华中师范大学化学学院, 农药与化学生物学教育部重点实验室, 武汉 430079

摘要:

运用TDDFT、ZINDO、INDO/S三种量子化学理论方法,对卟吩的单线垂直激发态进行了理论计算与归属研究.研究发现,对于卟吩类大分子而言, ZINDO和INDO/S方法对研究Q带和B带等特征的低能量激发态具有足够的精度,且对高能带也能给出定性的解释,可以用于更大的生物发色团分子的垂直激发态的理论研究.

关键词: 单线垂直激发态 时间相关密度泛函理论(TDDFT) 半经验分子轨道理论方法(INDO/S) Zerner's INDO/1(ZINDO)

收稿日期 2004-02-29 修回日期 2004-04-26 网络版发布日期 2004-09-15

通讯作者: 万坚 Email: jianwan@mail.ccnu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1132KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 单线垂直激发态

▶ 时间相关密度泛函理论

(TDDFT)

▶ 半经验分子轨道理论方法

(INDO/S)

▶ Zerner's INDO/1(ZINDO)

本文作者相关文章

▶ 任彦亮

▶ 万坚

▶ 刘俊军

▶ 万洪文