

光谱学与光谱分析

四种黄酮类化合物荧光光谱的量子化学研究

廖显威¹, 苏宇², 刘珊¹, 邓嘉莉¹

1. 四川师范大学化学与材料科学学院, 四川 成都 610066
2. 川北医学院化学教研室, 四川 南充 637007

收稿日期 2005-6-1 修回日期 2005-8-28 网络版发布日期 2006-8-26

摘要 采用量子化学半经验方法RHF/PM3对四种黄酮类化合物的荧光光谱进行了理论研究。首先, 采用能量梯度法对各化合物的构型进行了优化。所得结果表明, 在4个化合物中, 左侧两个六元环均在同一个平面内, 而右侧苯环平面与该平面有大小不等的扭转角。对4个优化构型进行振动分析, 均未出现虚频率, 说明所得构型基本合理。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 [黄酮](#) [荧光光谱](#) [量子化学](#) [CIS](#)

分类号 [O631.2](#), [TN383.1](#)

DOI:

通讯作者:
廖显威

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(402KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(OKB\)](#)
- ▶ [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“黄酮”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [廖显威](#)
- [苏宇](#)
- [刘珊](#)
- [邓嘉莉](#)