

光谱学与光谱分析

三种黄酮类化合物荧光光谱的量子化学研究

苏宇¹, 廖显威^{2*}, 刘珊², 邓嘉莉²

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

收稿日期 2005-8-8 修回日期 2005-11-18 网络版发布日期 2006-6-26

摘要 采用量子化学半经验方法PM3对三种黄酮类化合物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 [黄酮](#) [荧光光谱](#) [量子化学](#) [CIS](#)

分类号 [O641.12](#)

DOI:

通讯作者:
廖显威

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDE\(387KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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

· [苏宇](#)

· [廖显威](#)

· [刘珊](#)

· [邓嘉莉](#)