

Calculations of BODIPY dyes in the ground and excited states using the M06-2X and PBE0 functionals.

Autorzy

Marina Laine
Nuno A. Barbosa
Robert Wieczorek
Mikhail Ya. Melnikov
Aleksander Filarowski

Rok wydania

2016

Czasopismo

Journal of Molecular
Modeling

Numer woluminu

22

Strony

260/1-260/7

DOI

10.1007/s00894-016-3108-8

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

A number of fluorescent dyes based on BODIPY (4,4'-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacene) have been studied theoretically. This paper presents the results of calculations of these BODIPY dyes in their ground and excited states, performed using DFT and TD-DFT methods, respectively. The influences of *N,N*-dimethylaminobenzyl, *ortho*-fluorophenol, and methyl substituents as well as the solvent polarity on the positions of the absorption and emission bands of the dyes were analyzed. The computational data obtained in this work were compared to the corresponding experimental data. The trends in the experimental data were found to agree with those shown by the computational data. Differences between the potential curves obtained when using linear-response (LR) and state-specific (SS) approaches for the ground and excited states are also reported.

Słowa kluczowe

density functional theory, TD-DFT, BODIPY

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:

<https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode>

Adres publiczny

<http://dx.doi.org/10.1007/s00894-016-3108-8>

<http://link.springer.com>

Plik został wygenerowany dnia 2026-05-02 20:53:16

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/ict-Q32>.