روش‌های محاسباتی بررسی حالات برانگیخته الکترونی

روش‌های محاسباتی مختلفی برای بررسی حالات برانگیخته الکترونی وجود دارد. این روش‌ها به خصوص برای به دست آوردن توابع موج حالات برانگیخته یک مولکول، انرژی و دیگر ویژگی‌های مولکولی (مثل ممان دو قطبی) مورد استفاده قرار می‌گیرد. این محاسبات ابزار مهمی برای آنالیز اسپکتروسکوپی ، مکانیسم‌های واکنش و دیگر پدیده‌های حالات برانگیخته است.

این روش‌ها به طور کلی به سه دسته تقسیم می‌شوند. روش‌های آغازین، روش‌های تئوری تابعی چگالی و روش‌های نیمه تجربی. از روش‌های مختلف برای حالت برانگیخته می‌توان روش‌های برهمکنش آرایشی[1]، معادله حرکت خوشه جفت شده[2]، روش چند آرایشی میدان خود سازگار[3]، روش ساختار هندسی جبری[4]، روش برهمکنش آرایشی خوشه تطبیق تقارنی[5]، روش تابعی چگالی وابسته به زمان[6] و روش نیمه تجربی، zindo، را نام برد. از کاربردهای این روش‌ها علاوه بر بدست آوردن طیف UV، می‌توان به سیستم‌های شبکیه، فتوولتائیک، فتوابزارها و بازهای نوکلئوتیدی اشاره کرد.

هر کدام از این روش‌ها مزایا و معایبی دارند که باید با توجه به نوع سیستم روش را انتخاب کرد. تابع چگالی وابسته به زمان روشی برجسته به دلیل محاسبات کارآمد آن به شمار می‌رود اما از خطاهای معین متفاوتی رنج می‌برد. روش‌های تک مرجعی بر پایه خوشه جفت شده وجود دارد که نتایج با کیفیت بالا را در هندسه‌های نزدیک به مینیمم حالت پایه پیشنهاد می‌کند. روش‌های نیمه تجربی یک روش سریع‌تر محاسباتی را پیشنهاد می‌کند و روش‌های تک مرجعی مناسبی هستند که باید با دقت پارامتری شوند.

---

[1] Configuration interaction

[2] Equation of motion coupled cluster

[3] Multi configuration self consistent field

[4] Algebraic diagrammatic construction

[5] Symmetry adapted cluster configuration interaction

[6] Time dependent density function theory