引用信息: ZHANG Cai-Rong, CHEN Hong-Shan, CHEN Yu-Hong, WEI Zhi-Qiang, PU Zhong-Sheng. Acta Phys. -Chim. Sin., 2008, 24(08): 1353-1358 [张材荣 陈宏善 陈玉红 魏智强 蒲忠胜. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1353-1358]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

亚甲基富勒烯衍生物[6,6]-苯基-C₆₁丁酸甲酯的密度泛函研究

张材荣 陈宏善 陈玉红 魏智强 蒲忠胜

兰州理工大学理学院应用物理系, 兰州 730050; 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070

摘要:

运用密度泛函理论和含时密度泛函理论研究了亚甲基富勒烯衍生物[6,6]-苯基-C61丁酸甲酯(PCBM)的几种物理化学性质,包括几何结构、电子结构、电荷布居与成键,以及IR、Raman和电子吸收光谱.自然键轨道方法的结果表明,大约有0.11个电子通过成键由分子的一部分苯基和丁酸甲酯基团(电子给体)转移到富勒烯笼(电子受体).最强的IR和Raman谱峰来自于不同的振动模式,分别位于1773和1492 cm-1处.计算的各向同性极化率、极化率各向异性不变量以及超极化率分别是577.7、96.9、-22.8 a.u..基于含时密度泛函理论计算并分析了PCBM的电子吸收谱,在349 nm处的吸收峰与实验结果符合很好.

关键词: 亚甲基富勒烯衍生物 结构与性质 密度泛函理论 吸收光谱

收稿日期 2008-03-05 修回日期 2008-04-24 网络版发布日期 2008-06-04

通讯作者: 张材荣 Email: zhcrxy@lut.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(1550KB)

英文版PDF (KB)

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

Email Alert 文章反馈

引用本文

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶亚甲基富勒烯衍生物
- ▶结构与性质
- ▶ 密度泛函理论
- ▶吸收光谱

本文作者相关文章

- ▶张材荣
- ▶ 陈宏善
- ▶ 陈玉红
- ▶魏智强
- ▶蒲忠胜