

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

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](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[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](#)