

研究简报

C₅₀富勒烯及其二聚物C₁₀₀、C₁₀₁的光学性质

李晓东

南京师范大学化学与环境科学学院, 南京 210097

摘要:

运用B3LYP方法在6-31G*基组水平上对C₅₀富勒烯以及它的两个不同二聚物C₁₀₀、C₁₀₁的几何构型进行了全优化. 在优化所得构型的基础上, 采用TDB3LYP方法在3-21G*基组水平上对其激发态性质、电子吸收光谱进行了研究, 根据计算得到的态间跃迁偶极矩和跃迁能等数据, 结合使用态求和公式进一步计算得到了它们不同光学过程中的三阶非线性极化率. 结果表明, 当C₅₀富勒烯二聚以后, 其电子吸收光谱的最大波长吸收峰发生了明显的红移, 三阶非线性极化率有了较大的提高. 其中, [5,5]-[5,5]哑铃型二聚物C₁₀₁有着比[2+2]闭环型二聚物C₁₀₀更大的三阶非线性极化率.

关键词: C₅₀富勒烯 二聚物 吸收光谱 三阶非线性光学极化率

收稿日期 2007-05-07 修回日期 2007-07-19 网络版发布日期 2007-09-03

通讯作者: 李晓东 Email: lixiaodong1@njnu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(759KB)

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

▶ C₅₀富勒烯

▶ 二聚物

▶ 吸收光谱

▶ 三阶非线性光学极化率

本文作者相关文章

▶ 李晓东