

## C~5~9HN的电子结构、UV-vis光谱及非线性光学性质的理论研究

任爱民,封继康,李伟,孙秀云,李志儒

吉林大学理论化学计算国家重点实验室;吉林大学超分子结构及谱学开放实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 对一种碳笼骨架氮取代化合物C~5~9HN用INDO系列方法进行了理论研究,得到了C~5~9HN的电子结构、分子稳定性、UV-vis光谱及二阶非线性光学系数。

**关键词** [笼状结构](#) [微分重氮间忽略近似](#) [电子结构](#) [富勒烯](#) [紫外分光光度法](#) [非线性光学](#) [光学性质](#)

分类号 [0641](#)

## Theoretical study on the electronic structure, spectrum and nonlinear second-order optical property of C~5~9HN

Ren Aimin, Feng Jikang, Li Wei, Sun Xiuyun, Li Zhiru

**Abstract** We have conducted a theoretical study on the azafullerene C~5~9HN with the INDO series methods, and obtained the following results: electronic structure, molecular stability, UV-vis spectrum and nonlinear second-order optical susceptibility.

**Key words** [CAGE STRUCTURE](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [FULLERENES](#) [ULTRAVIOLET SPECTROPHOTOMETRY](#) [NON LINEAR OPTICS](#) [OPTICAL PROPERTIES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(367KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

### 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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

### 相关信息

- ▶ [本刊中 包含“笼状结构”的 相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [任爱民](#)
- [封继康](#)
- [李伟](#)
- [孙秀云](#)
- [李志儒](#)