

研究论文

(ZnS)_{6~12}团簇三阶非线性光学性质的理论研究

张欣, 黄婷婷, 谭凯, 林梦海, 张乾二

厦门大学化学系, 固体表面物理化学国家重点实验室, 理论化学中心, 厦门 361005

收稿日期 2006-8-12 修回日期 网络版发布日期 2007-6-6 接受日期

摘要 在TDDFT/LanI2DZ+6-31G*水平下对(ZnS)_{6~12}半导体团簇的三阶非线性光学性质进行了计算, 并用态求和(SOS)方法得到静态三阶宏观极化率 $\chi^{(3)}$ 和0~2.5 eV范围内输入光子能量对三阶微观极化率 γ 的动态行为. 结果表明, (ZnS)_{6~12}的 $\chi^{(3)}$ 值比其它半导体团簇的略好. 且(ZnS)₇和(ZnS)₁₁分别在1.6和2.0 eV处出现了很大的 γ 值, 为 -2.38×10^{-33} 和 1.26×10^{-33} esu. 在此输入光子能量处激发, 它们将会产生很强的三阶非线性光学效应.

关键词 [ZnS](#) [半导体团簇](#) [三阶非线性光学性质](#) [理论计](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

林梦海 linmh@xmu.edu.cn

作者个人主页: 张欣; 黄婷婷; 谭凯; 林梦海; 张乾二

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(530KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“ZnS”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [张欣, 黄婷婷, 谭凯, 林梦海, 张乾二](#)