

扩展卟啉分子的多光子吸收特性

何远航; 惠仁杰; 易院平; 帅志刚

北京理工大学宇航科学技术学院, 北京 100081; 中国科学院化学研究所, 北京 100080

摘要:

发展关联电子体系的多参考组态相互作用方法, 应用态求和的张量方法, 计算研究了三种扩展卟啉分子的多光子吸收特性. 计算结果表明, 通过中间插入噻吩杂环基团, 扩展卟啉分子的双光子和三光子吸收峰发生较大红移, 对应的吸收截面得到显著提高, 并且三光子吸收截面的增加更为明显; 但是由于卟啉环扩大导致分子平面发生扭曲, 三光子吸收截面的增大趋势明显减弱.

关键词: 多光子吸收 态求和张量方法 卟啉衍生物 多参考组态方法

收稿日期 2007-10-24 修回日期 2007-12-21 网络版发布日期 2008-02-19

通讯作者: 帅志刚 Email: zgshuai@iccas.ac.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(415KB)

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

▶ 多光子吸收

▶ 态求和张量方法

▶ 卟啉衍生物

▶ 多参考组态方法

本文作者相关文章

▶ 何远航

▶ 惠仁杰

▶ 易院平

▶ 帅志刚