
钷金属—有机 团簇的三阶非线性光学响应研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37179.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

钷金属—有机 团簇的三阶非线性光学响应研究获进展。金属—有机 团簇通过金属d轨道与配体p轨道的杂化，实现了双重芳香协同效应，提升了体系的电子离域能力，为光电功能材料的设计提供了新平台。

近日，中国科学院福建物质结构研究所等提出一种组装策略：以钷金属杂戊搭炔片段为基础单元，组装出 Os_3 —plane团簇为结构基元，并通过两种组装方式构建出4种高阶结构。水平组装：通过C—C共价键连接，构建平面波浪形扩展结构。垂直组装：通过 Os — Os 金属间相互作用堆叠，形成棱柱状立体结构；其轨道组成、多中心成键特性及芳香特性表明5个团簇的配体与簇芯均具有离域 轨道和芳香性，属于典型的金属—有机 团簇。每种结构表现出增强的三阶非线性光学性能，其中 Os_9 —plane的三阶非线性光学响应系数比 Os_3 —plane高出两个数量级。

系统分析显示，水平组装通过准二维 离域增强了面内 共轭，垂直堆叠促进了层间 轨道重叠。 Os_9 —plane结构表现出窄的HOMO—LUMO能隙、更低的激子结合能、增强的电子离域、更宽的电子—空穴空间分布以及扩展的 离域框架等特性，这协同促进 Os_9 —plane的激发态趋于低能强激发，获得了优异的三阶非线性光学响应系数。

这一研究为三阶非线性光学材料的发展提供了新思路，并为光电功能材料的结构—性能调控提供了参考。

研究工作得到国家自然科学基金和中国博士后科学基金的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：福建物质结构研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发