

第一性原理研究O和S掺杂的石墨相氮化碳 (g-C₃N₄)₆量子点电子结构和光吸收性质*

翟顺成^{1)†} 郭平^{1)‡} 郑继明²⁾ 赵普举¹⁾ 索兵兵³⁾ 万云¹⁾

1)(西北大学物理学院, 西安 710069)

2)(西北大学光子学与光子技术研究所, 西安 710069)

3)(西北大学现代物理研究所, 西安 710069)

对小尺寸(g-C₃N₄)_n量子点的几何、电子结构及吸收光谱系统研究的部分结果如图S1和表S1所示.



图S1 (a) 不同大小(g-C₃N₄)_n量子点几何结构优化;
(b) TDDFT模拟的不同大小(g-C₃N₄)_n量子点吸收光谱

Fig. S1. (a) The optimized geometry of (g-C₃N₄)_n quantum dots with different sizes; (b) UV-visible absorption spectra of (g-C₃N₄)_n quantum dots of different sizes by TDDFT simulation.

表S1 不同大小(g-C₃N₄)_n量子点的激发能(激发波长)和吸收强度

Table S1. Excitation energies (wavelengths) and absorption intensity for (g-C₃N₄)_n quantum dots with different sizes.

分子	激发能/eV	吸收强度/ <i>f</i>
(g-C ₃ N ₄) ₁	8.56 (145 nm)	0.4315
	6.86 (181 nm)	0.2090
	5.79 (214 nm)	1.9839
	4.67 (266 nm)	0.1477
(g-C ₃ N ₄) ₃	4.42 (281 nm)	1.3973
	3.97 (313 nm)	0.2477
	3.65 (340 nm)	0.3299
(g-C ₃ N ₄) ₆	3.61 (344 nm)	0.4575
	3.1 (401 nm)	0.0643
(g-C ₃ N ₄) ₁₀	3.06 (406 nm)	0.0744
	2.83 (439 nm)	0.0358
	2.59 (480 nm)	0.0326
	2.44 (508 nm)	0.0215
	2.36 (525 nm)	0.0189
(g-C ₃ N ₄) ₁₅	2.59 (479 nm)	0.0567
	2.37 (524 nm)	0.0362
	2.16 (574 nm)	0.0037

* 国家自然科学基金(批准号: 21673174)、陕西省自然科学基金(批准号: 2014JM2-1008)和2015国家重点实验室瞬态光学与光子技术自然开放基金(批准号: SKLST200915)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: 1121074564@qq.com

‡ 通信作者. E-mail: guoping@nwu.edu.cn