

钠原子连接的C₆₀富勒烯二聚物的等离激元激发

尹海峰^{1,2} 曾春花³ 张红²

¹凯里学院物理与电子工程学院, 贵州 凯里 556011

²四川大学物理科学与技术学院, 四川 成都 610065

³凯里学院数学科学学院, 贵州 凯里 556011

摘要 基于含时密度泛函理论,研究了钠原子连接的C₆₀富勒烯二聚物的等离激元激发。由于碱金属钠原子和C₆₀分子之间的耦合,在红外光谱区,钠原子连接的C₆₀富勒烯二聚物出现了等离激元共振激发。随着C₆₀分子之间间隙的逐渐减小,红外光谱区的等离激元先发生红移,之后发生了蓝移。在间隙较大,C₆₀分子间电容性相互作用时,中红外光谱区的等离激元是一种多极共振模式。在间隙较小时,由于电子的隧穿,中红外光谱区的等离激元逐渐演化为近红外光谱区的另外一种等离激元共振模式,该等离激元共振模式是长程电荷转移激发模式和多极共振模式的耦合。

关键词 原子与分子物理学;等离激元;含时密度泛函理论;C₆₀富勒烯二聚物

中图分类号 O436.2

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201535.0224001

Plasmon Excitation in C₆₀ Fullerene Dimers Connected by a Sodium Atom

Yin Haifeng^{1,2} Zeng Chunhua³ Zhang Hong²

¹College of Physics and Electronic Engineering, Kaili University, Kaili, Guizhou 556011, China

²College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu, Sichuan 610065, China

³School of Mathematical Sciences, Kaili University, Kaili, Guizhou 556011, China

Abstract Plasmon resonances in C₆₀ fullerene dimers connected by a sodium atom are investigated using time-dependent density functional theory. Because of the coupling between alkali metal sodium atom and C₆₀ fullerene, in the infrared spectral region, plasmon resonances emerge in C₆₀ fullerene dimers connected by a sodium atom. With the gradual decrease of the gap between two C₆₀ fullerenes, plasmons of the infrared spectral region firstly show red shift, and then show blue shift. For large gap, the coupling between fullerenes is capacitive, and the plasmon of mid-infrared spectral region is a multipole plasmon resonant mode. For the smaller gap, the plasmon of mid-infrared spectral region gradually evolves into another plasmon resonant mode of near-infrared spectral region due to the electron tunneling. This mode is the coupling of the charge transfer plasmon mode and the multipole plasmon resonant mode.

Key words atomic and molecular physics; plasmon; time-dependent density functional theory; C₆₀ fullerene dimers

OCIS codes 240.6680; 250.5403; 300.6340

1 引 言

自C₆₀分子被发现以来,人们在理论和实验上对富勒烯分子做了大量的研究,发现这些材料具备许多优

收稿日期: 2014-08-05; 收到修改稿日期: 2014-09-02

基金项目: 国家自然科学基金(11474207, 11464023)、凯里学院原子与分子物理重点学科资助课题

作者简介: 尹海峰(1982—),男,博士,副教授,主要从事大分子团簇及纳米材料等离激元方面的研究。

E-mail: yinhaifeng1212@126.com

本文电子版彩色效果请详见中国光学期刊网 www.opticsjournal.net

异的物理化学性质^[1-5]。由于等离子激元在生物传感器、太阳能电池、医学治疗以及纳米光电子学等方面具有着重要的应用^[6-8],近年来富勒烯分子的等离子激元特性也越来越受到关注^[9-14]。Keller等^[15]实验上用电子能量损失谱研究了C₆₀分子中电子的等离子激元激发,发现体系中存在两个主要的等离子激元共振带。基于含时密度泛函理论,Rubio等^[16]研究了C₆₀分子中电子的聚集激发,发现两个主要的等离子激元共振带分别为位于6 eV附近的 π 等离子激元共振带和位于20 eV附近的 $\pi + \sigma$ 等离子激元共振带。近来,Verkhovtsev等^[9-10]基于经典的电磁理论研究了电子非弹性散射和光致电离过程中C₆₀分子等离子激元激发的形成机制,他们发现同金属团簇一样,在C₆₀分子中也存在两种不同的等离子激元共振模式,分别称为表面等离子激元模式和体等离子激元模式。其中,偶极共振表面等离子激元形成了C₆₀分子光致电离谱中的巨共振,在电子非弹性散射时,非均匀的外电场促使C₆₀分子的体等离子激元共振模式形成。

纳米颗粒对即纳米颗粒二聚物,对纳米颗粒二聚物等离子激元的研究有助于理解更复杂的纳米结构之间等离子激元的杂化机理。随着纳米颗粒之间间隙的改变,Zuloaga等^[17]研究发现金属纳米颗粒二聚物间存在三种截然不同的相互作用区。由于纳米颗粒的等离子激元激发特性依赖于纳米颗粒的材料和形状,人们研究了不同形状和材料的纳米颗粒二聚物表面等离子激元的特征^[18-19]。基于含时密度泛函理论,研究了C₆₀富勒烯二聚物的等离子激元激发^[20]。结果发现,当减小两个C₆₀分子之间的间隙时,由于电子的隧穿,C₆₀富勒烯二聚物的等离子激元共振模式发生了改变,长程电荷转移激发模式形成。与金属纳米结构二聚物不同,当再继续减小间隙时,长程电荷转移激发模式没有发生蓝移,而是继续红移。紧接着,Moradi^[21]基于线性流体力学理论研究了C₆₀富勒烯二聚物的多极等离子激元激发,发现当两个C₆₀分子逐渐靠近时,由于C₆₀分子间等离子激元的相互耦合在富勒烯二聚物中会形成新的多极等离子激元共振模式。此外,由于等离子激元在分子结的光激发和电子输运方面起着重要的作用,近年来人们越来越关注二聚物的等离子激元和分子之间的耦合特性^[19]。比如,Song等^[19]基于含时密度泛函理论研究了金属纳米球二聚物的不同等离子激元共振模式和二聚物间隙处钠原子的耦合规律。到目前为止,还未公开发表关于C₆₀富勒烯二聚物的等离子激元和间隙处小分子之间的耦合特性。本文对C₆₀富勒烯二聚物的等离子激元激发和间隙处钠原子之间的耦合特性进行了理论研究,采用含时密度泛函理论,主要探究随着间隙改变时,C₆₀富勒烯二聚物的等离子激元激发和钠原子之间耦合特性的演变规律。

2 计算方法

采用含时密度泛函理论^[22]来计算钠原子连接的C₆₀富勒烯二聚物的吸收光谱。在体系的基态计算得到电子的占据态信息后,可以通过时间演化波函数的方法来计算电子的激发态。在时间 $t=0$ 时刻使所有波函数 φ_i 有个瞬时的相位移动^[23]:

$$\varphi_i(\mathbf{r}, \delta t) = \exp(ik_0 z)\varphi_i(\mathbf{r}, 0), \quad (1)$$

式中 k_0 为沿 z 方向所加的微扰外场动量, \mathbf{r} 为位置矢量, δt 为时间 t 的微小增量。这相当于加 $E(t) = k_0 \delta(t)$ 的微扰外场。Kohn-Sham波函数时间演化后可以得到含时偶极矩 $D(t)$ 。通过对偶极矩求傅立叶变换得到动态极化率 $\alpha(\omega)$,其中 ω 为电子振动的频率。吸收光谱可以用偶极子强度函数 $Q(\omega)$ 来表示,它与极化率的关系为 $Q(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im}[\alpha(\omega)]$ 。

所有的含时密度泛函理论计算都是用实时、实空间的OCTOPUS软件来完成的^[23]。碳原子和钠原子用模守恒赝势来描述。对基态和激发态的计算,交换关联势使用的都是局域密度近似。C₆₀富勒烯二聚物位于实空间模拟所用盒子的中心,碳原子到盒子边界最近的距离为1 nm,钠原子位于两个C₆₀分子中心连线的中间点。在盒子内使用间距为0.03 nm的均匀格点,时间演化步长为 3.3×10^{-18} s,电子波函数的演化总时间为 2.64×10^{-14} s。

3 计算结果与讨论

采用笛卡尔直角坐标系,两个C₆₀分子中心连线与 x 坐标轴平行,如图1所示。主要讨论沿两个C₆₀分子中心连线方向,随着间隙 d 变化时,C₆₀富勒烯二聚物的低能区 π 等离子激元激发和钠原子之间耦合特性的演

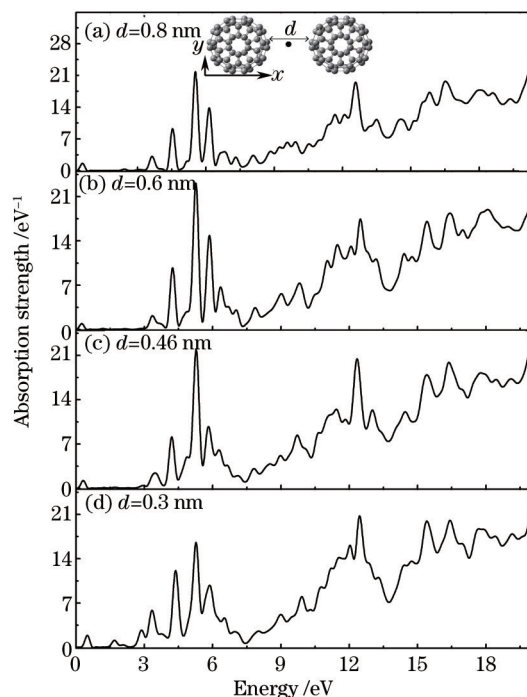


图 1 沿 x 轴线方向激发时, 钠原子连接的 C_{60} 富勒烯二聚物的吸收光谱

Fig.1 Optical absorption spectra of C_{60} fullerene dimers connected by a sodium atom to an impulse excitation polarized in the x -axis direction

变规律。

3.1 吸收光谱

图 1 为当间隙 d 由 0.8 nm 减小到 0.3 nm 时, 钠原子连接的 C_{60} 富勒烯二聚物沿 x 坐标轴方向的吸收光谱。图 1 中的数字表示的是 C_{60} 富勒烯二聚物中两个 C_{60} 分子之间的距离。插图 为 钠 原 子 连 接 的 C_{60} 富 勒 烯 二 聚 物 的 结 构 示 意 图, 其 中 C_{60} 富 勒 烯 二 聚 物 中 间 的 黑 点 表 示 钠 原 子。同单个 C_{60} 分子的情况相同^[15], 体系仍然有两个主要的等离子共振带, 分别位于 6 eV 和 20 eV 附近。当间隙 d 比较大时, 钠原子和 C_{60} 分子之间的相互作用是电容性的, 没有电子可以穿过钠原子和 C_{60} 分子之间的势垒。随着间隙 d 的逐渐减小, 由于钠原子和 C_{60} 分子之间的势垒降低, 电子可以较容易地隧穿过势垒, 在整个体系中来回运动, 量子效应开始发挥作用。在低能共振区, 长程电荷转移激发模式逐渐形成。与 C_{60} 富勒烯二聚物相比^[20], 钠原子连接的 C_{60} 富勒烯二聚物的吸收光谱的演化规律既有相同之处, 也有不同之处。首先, 来讨论两个体系吸收光谱演化规律的相同之处。在间隙 d 逐渐减小的过程中, 由于电子的隧穿, 虽然钠原子连接的 C_{60} 富勒烯二聚物的等离子共振模式发生改变, 体系位于 6 eV 附近的低能等离子共振带却一直逐渐展宽和单调红移。这种演化规律与 C_{60} 富勒烯二聚物等离子共振的演化规律相同。此外, 尽管受到间隙处钠原子的影响, 对于不同的间隙, 在共振能量大于 1.5 eV 的光谱区, 钠原子连接的 C_{60} 富勒烯二聚物和 C_{60} 富勒烯二聚物的吸收光谱的线形和主要吸收峰的位置基本一致^[20]。

讨论与 C_{60} 富勒烯二聚物相比, 钠原子连接的 C_{60} 富勒烯二聚物等离子共振激发主要的不同之处。由于钠原子的影响, 在中红外区域 0.3 eV 附近出现了一个新的吸收峰。在两个 C_{60} 分子间隙 $d=0.8$ nm, 钠原子和 C_{60} 分子之间的势垒较大时, 该吸收峰位于 0.29 eV。随着间隙的减小, 在 $d=0.6$ nm 时, 该吸收峰位于 0.26 eV, 即共振吸收峰的位置发生了红移。当继续减小两个 C_{60} 分子的间隙, 由于势垒的降低, 量子效应开始发挥作用, 在 $d=0.46$ nm 和 $d=0.3$ nm 时, 该共振吸收峰分别位于 0.32 eV 和 0.5 eV, 即该区域等离子共振能量随着间隙的减小由中红外光谱区蓝移到近红外光谱区。该结果表明, 由于电子的隧穿, 在整个体系中长程电荷转移激发模式形成后, 随着间隙的进一步减小, 共振吸收峰的位置发生了蓝移。这种结果与金属纳米球二聚物等离子共振的耦合类似^[17]。对于金属纳米球, 在间距较大的经典作用区, 二聚物中的等离子共振能量点随

着纳米颗粒间距的减小,发生单调的红移;在间隙只有 0.1 nm 量级时,由于电子的隧穿,在二聚物中电荷转移等离激元激发模式形成,该等离激元共振模式随着间隙的进一步减小将发生蓝移。此外,还优化了钠原子连接的 C₆₀富勒烯二聚物的结构,结果表明当两个 C₆₀分子之间的间隙为 0.486 nm 时,体系最为稳定。在间隙为 0.486 nm 时,相对于 C₆₀富勒烯二聚物,钠原子连接的 C₆₀富勒烯二聚物在中外光谱区同样出现了一个新的共振吸收峰。

3.2 诱导电荷分布

为了更进一步说明钠原子连接的 C₆₀富勒烯二聚物低能等离激元共振的物理机制,计算了各个吸收峰共振频率所对应的诱导电荷密度分布。首先分析红外区共振模式对应的诱导电荷密度分布。图 2 给出两个 C₆₀分子之间的间隙为 $d = 0.8$ nm 和 $d = 0.3$ nm 时,等离激元能量共振点 0.29 eV 和 0.5 eV 所对应的傅立叶变换诱导电荷密度分布。傅立叶变换的诱导电荷密度计算公式为 $\delta\rho(\mathbf{r},\omega) = \frac{1}{T} \int_0^T [\rho(\mathbf{r},T) - \rho(\mathbf{r},0)] \exp(i\omega t) dt$,其中 T 为电子波函数演化的总时间。通过变换,可以得到该频率集体激发所对应电荷的空间分布。图 2 中箭头标示的方向为沿图 1 所示的 x 轴方向,给出的诱导电荷密度平面为两个 C₆₀分子中心所在的平面。图 2 (a)是在钠原子与 C₆₀分子之间的势垒较大时,0.29 eV 处等离激元共振模式对应的诱导电荷密度分布,中间是单个钠原子的诱导电荷密度。虽然初始时的微扰电场沿着 x 轴方向,然而在 C₆₀分子中却激起了多极等离激元共振模式,C₆₀分子外边为负电荷,里面为正电荷。以前对于 C₆₀富勒烯二聚物等离激元激发的研究中^[20],没有发现这种共振模式。按照 Verkhovtsev 等^[10]对于单个 C₆₀分子等离激元的研究,这种等离激元共振模式又称为体等离激元共振模式,他们发现只有非均匀的外电场才会促使 C₆₀分子的体等离激元共振模式形成。在本研究中,间隙处钠原子的影响促使 C₆₀富勒烯二聚物中也形成这种新的等离激元共振模式。此外,由于钠原子与 C₆₀分子之间的势垒较大,隧穿电子较少,该等离激元共振模式的诱导电荷密度分布,类似于两个单独排列的 C₆₀分子体离激元共振模式对应的诱导电荷密度分布,所不同的是在间隙处增加了钠原子的诱导电荷密度分布。

图 2 (b) 是间隙较小 $d = 0.3$ nm 时,0.5 eV 等离激元共振模式对应的诱导电荷密度分布。由于 C₆₀分子和钠原子间的势垒很小,自由电子很容易越过势垒在整个体系中来回运动,形成大的偶极子共振如图 2(b)所示。主要的正、负诱导电荷密度分布于 C₆₀分子所在球面外部区域。然而,在每个 C₆₀分子内部还有相应相反的诱导电荷密度分布。因此,可以认为这种等离激元共振模式是长程电荷转移激发模式和 C₆₀分子体等离激元共振模式的耦合,部分电子在整个体系中来回运动,另外一部分电子在一个 C₆₀分子中来回运动。图 2 (b) 的结果还表明间隙处钠原子的 s 电子已离域化,参与该模式等离激元共振激发。

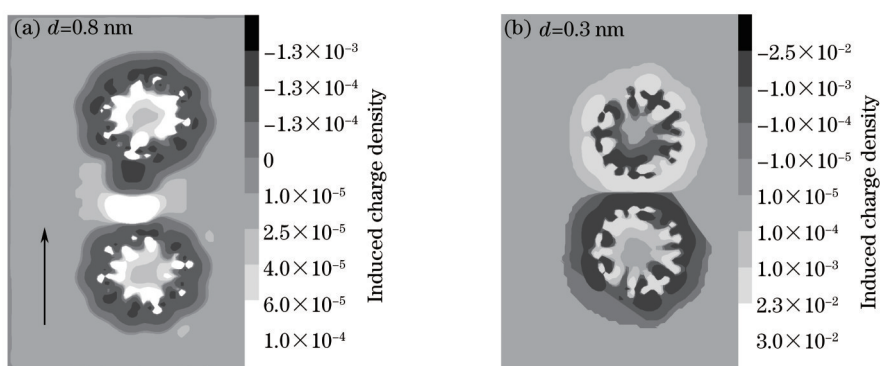


图 2 在等离激元能量共振点(a) 0.29 eV 和(b) 0.5 eV 的傅里叶变换诱导电荷密度分布

Fig.2 Fourier transform of the induced charge density at the energy resonance points of (a) 0.29 eV and (b) 0.5 eV

图 3 是在两个 C₆₀分子中心所在的平面内,两个 C₆₀分子之间的间隙分别为 $d = 0.8$ nm 和 $d = 0.3$ nm 时,在等离激元能量共振点 3.34 eV 的诱导电荷密度分布。在间隙较大时,同 C₆₀富勒烯二聚物在 3.41 eV 处等离激元共振模式对应的诱导电荷密度分布大致相同^[20],图 3(a)所示钠原子连接的 C₆₀富勒烯二聚物在 3.34 eV 的诱导电荷密度分布也类似于两个单独排列的 C₆₀分子等离激元共振模式对应的诱导电荷密度分布。与

Moskalenko 等^[12]对于单个 C₆₀ 分子低能等离子激元共振对应的电荷密度分布模式相同, 在 C₆₀ 分子周围一端的诱导电荷密度分布依次为负诱导电荷、正诱导电荷、负诱导电荷, 另一端诱导电荷分布与此顺序相反。自由的 π 电子在外电场的诱导下形成了这种偶极等离子激元共振模式。此外, 图 3(a) 的结果也表明, 钠原子连接的 C₆₀ 富勒烯二聚物与 C₆₀ 富勒烯二聚物的低能等离子激元共振模式也有不同之处。在间隙处, 由于钠原子和 C₆₀ 分子的耦合, 钠原子连接的 C₆₀ 富勒烯二聚物的低能等离子激元共振模式对应的正负诱导电荷密度分布的空间比较大。图 3 (b) 是间隙 $d = 0.3$ nm 时, 等离子激元能量共振点 3.34 eV 的诱导电荷密度分布。由于钠原子和 C₆₀ 分子之间的势垒较低, 自由电子可以在整个体系中来回运动。主要的正诱导电荷密度主要分布于一个 C₆₀ 分子所在球面内外区域, 主要的负诱导电荷密度主要分布于另一个 C₆₀ 分子所在球面内外区域。由于 π 电子受到碳原子势局域束缚的作用, 碳原子所在的地方附近形成了相反的诱导电荷密度。此外, 同间隙较小时 C₆₀ 富勒烯二聚物在 3.55 eV 处的等离子激元共振模式相比^[20], 可以认为是由于受到钠原子势局域束缚的影响, 对于钠原子连接的 C₆₀ 富勒烯二聚物在 3.34 eV 的等离子激元, 虽然主要的正(或负)诱导电荷密度主要分布于一个 C₆₀ 分子所在球面内外区域, 但在这个球面内外区域也出现了少许的负(或正)电荷密度, 如图 3 (b) 所示。

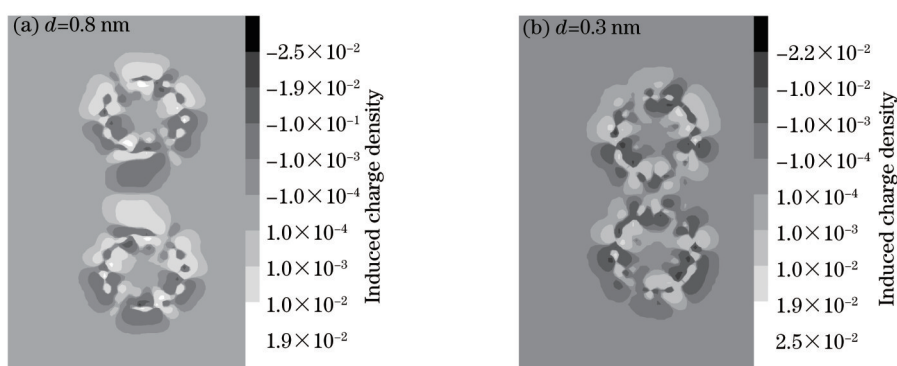


图 3 在等离子激元能量共振点 3.34 eV 的傅里叶变换诱导电荷密度分布

Fig.3 Fourier transform of the induced charge density at the energy resonance point of 3.34 eV

4 结 论

采用含时密度泛函理论系统地研究了随着间隙改变时, 钠原子连接的 C₆₀ 富勒烯二聚物的等离子激元激发的演化规律。在红外光谱区, 由于碱金属钠原子和 C₆₀ 分子之间的耦合, 钠原子连接的 C₆₀ 富勒烯二聚物出现了等离子激元共振激发。在间隙较大时, 虽然初始时的微扰电场沿着两个 C₆₀ 分子中心连线方向, 然而在 C₆₀ 分子中却激起了多极等离子激元共振模式, 又称体等离子激元共振模式。对于单个 C₆₀ 分子, 只有非均匀的外电场才会促使 C₆₀ 分子的体等离子激元共振模式形成。随着间隙的减小, 势垒的降低, 自由电子可以在整个体系中来回运动, 中红外光谱区的多极等离子激元共振模式逐渐演化为近红外光谱区另外一种新的等离子激元共振模式。该等离子激元共振模式是长程电荷转移激发模式和 C₆₀ 分子体等离子激元共振模式的耦合, 部分电子在整个体系中来回运动, 另外一部分电子在单个 C₆₀ 分子中来回运动。在其他光谱区, 随着间隙的减小, 钠原子连接的 C₆₀ 富勒烯二聚物的吸收光谱与 C₆₀ 富勒烯二聚物的吸收光谱的线形和主要吸收峰的位置基本相同, 等离子激元共振模式的演化规律也基本相同。

参 考 文 献

- 1 H W Kroto, J R Heath, S C O'Brien, *et al.*. C₆₀: Buckminsterfullerene[J]. Nature, 1985, 318(6042): 162-163.
 - 2 N Iwahara, L F Chibotaru. Dynamical Jahn-Teller effect and antiferromagnetism in Cs₃C₆₀[J]. Phys Rev Lett, 2013, 111(5): 056401.
 - 3 R C Bilodeau, N D Gibson, C W Walter, *et al.*. Single-photon multiple detachment in fullerene negative ions: absolute ionization cross sections and the role of the extra electron [J]. Phys Rev Lett, 2013, 111(4): 043003.
 - 4 Qian Jiang, Xu Hong, Qian Shixiong. Study of third-harmonic generation in polymer-fullerene films [J]. Acta Optica Sinica, 1997, 17(10): 1306-1310.
- 钱江, 徐宏, 钱士雄. 高聚物-富勒烯体系薄膜微微秒三倍频效应研究[J]. 光学学报, 1997, 17(10): 1306-1310.

- 5 Liu Xiu, Guo Lijun, Wang Wenjun, *et al.*. Photoelectric characteristics of charge-transferring metal doped [60] fullerenes [J]. *Acta Optica Sinica*, 2002, 22(2): 223-225.
刘 秀, 郭立俊, 王文军, 等. 电荷转移金属[60]富勒烯盐的光电性质[J]. *光学学报*, 2002, 22(2): 223-225.
- 6 Yu Jie, Zhang Junxi, Zhang Lide, *et al.*. Surface plasmonic micropolarizers based Ag nanorod arrays [J]. *Acta Optica Sinica*, 2014, 34(7): 0723001.
于 杰, 张俊喜, 张立德, 等. 基于 Ag 纳米棒阵列的表面等离激元微型偏振器[J]. *光学学报*, 2014, 34(7): 0723001.
- 7 Zhang Haosu, Zhu Jun, Zhu Zhendong, *et al.*. Bottom-emitting surface-plasmon-enhanced GaN-LED based on sinusoidal nano-gratings [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013, 50(4): 042302.
张洪酥, 朱 钧, 朱振东, 等. 基于正弦微纳光栅的反射式表面等离激元增强型 GaN-LED [J]. *激光与光电子学进展*, 2013, 50(4): 042302.
- 8 Zou Weibo, Zhou Jun, Zhang Haopeng, *et al.*. Optical scattering properties of bimetallic nanodisk dimers [J]. *Chinese J Lasers*, 2013, 40(11): 1106001.
邹伟博, 周 骏, 张昊鹏, 等. 复合金属纳米盘二聚物的散射特性[J]. *中国激光*, 2013, 40(11): 1106001.
- 9 A V Verkhovtsev, A V Korol, A V Solov'yov. Quantum and classical features of the photoionization spectrum of C₆₀ [J]. *Phys Rev A*, 2013, 88(4): 043201.
- 10 A V Verkhovtsev, A V Korol, A V Solov'yov. Plasmon excitations in photo- and electron impact ionization of fullerenes [C]. *J Phys: Conf Ser*, 2013, 438(1): 012011.
- 11 F Rossel, M Pivetta, F Patthey, *et al.*. Plasmon enhanced luminescence from fullerene molecules excited by local electron tunneling [J]. *Opt Express*, 2009, 17(4): 2714-2721.
- 12 A S Moskalenko, Y Pavlyukh, J Berakdar. Attosecond tracking of light absorption and refraction in fullerenes [J]. *Phys Rev A*, 2012, 86(1): 013202.
- 13 M F Xu, X Z Zhu, X B Shi, *et al.*. Plasmon resonance enhanced optical absorption in inverted polymer-fullerene solar cells with metal nanoparticle-doped solution-processable TiO₂ layer [J]. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2013, 5(8): 2935-2942.
- 14 C Z Li, Z L Miškovi, F O Goodman, *et al.*. Plasmon excitations in C₆₀ by fast charged particle beams [J]. *J Appl Phys*, 2013, 113(18): 184301.
- 15 J W Keller, M A Coplan. Electron energy loss spectroscopy of C₆₀ [J]. *Chem Phys Lett*, 1992, 193(1-3): 89-92.
- 16 A Rubio, J A Alonso, J M Lopez, *et al.*. Surface plasmon excitations in C₆₀, C₆₀K and C₆₀H clusters [J]. *Physica B*, 1993, 183(3): 247-263.
- 17 J Zuloaga, E Prodan, P Nordlander. Quantum description of the plasmon resonances of a nanoparticle dimer [J]. *Nano Lett*, 2009, 9(2): 887-891.
- 18 C Y Tsai, J W Lin, C Y Wu, *et al.*. Plasmonic coupling in gold nanoring dimers: observation of coupled bonding mode [J]. *Nano Lett*, 2012, 12(3): 1648-1654.
- 19 P Song, S Meng, P Nordlander, *et al.*. Quantum plasmonics: Symmetry-dependent plasmon-molecule coupling and quantized photoconductances [J]. *Phys Rev B*, 2012, 86(12): 121410.
- 20 Yin Haifeng, Zhang Hong, Yue Li. Plasmon excitation in C₆₀ fullerene dimers [J]. *Acta Physica Sinica*, 2014, 63(12): 127303.
尹海峰, 张 红, 岳 莉. C₆₀富勒烯二聚物的等离激元激发[J]. *物理学报*, 2014, 63(12): 127303.
- 21 A Moradi. Multipole plasmon excitations of C₆₀ dimers [J]. *J Chem Phys*, 2014, 141(2): 024111.
- 22 M A L Marques, A Castro, G F Bertsch, *et al.*. Octopus: A first-principles tool for excited electron-ion dynamics [J]. *Comput Phys Commun*, 2003, 151(1): 60-78.
- 23 K Yabana, G F Bertsch. Time-dependent local-density approximation in real time [J]. *Phys Rev B*, 1996, 54(7): 4484-4487.

栏目编辑: 史 敏