

外场作用下蒽分子的激发特性研究*

徐国亮[†] 袁伟 耿振铎 刘培 张琳 张现周 刘玉芳

(河南师范大学物理与电子工程学院, 新乡 453007)

(2012年10月11日收到; 2012年11月21日收到修改稿)

蒽 (anthracene) 具有良好的热稳定性以及较高的荧光量子产率的优点, 是最早用于研究有机发光器件 (organic light-emitting device, OLED) 的材料之一. 在本文中, 主要利用量子化学方法研究了不同外电场对蒽分子激发特性的影响规律. 首先采用密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 在 6-311G(d, p) 基组水平上对蒽分子基态结构进行优化, 基于稳定基态结构, 利用含时密度泛函 (time-dependent density functional theory, TDDFT) 以及同一基组水平, 计算出蒽分子的前十个激发态的激发能、跃迁偶极矩、振子强度和紫外吸收光谱等数据. 然后以密度泛函 B3P86 方法优化出的不同外电场下蒽分子基态结构为基础, 使用 TDDFT 方法研究了不同外电场对蒽分子前线轨道能级和激发特性的影响规律. 结果显示, 无场时蒽分子在紫外区域 234.50 nm 处有一个较强的吸收峰, 对应基态电子跃迁至第 5 激发态吸收光子波长; 在外电场作用下, 蒽分子电子由基态跃迁到激发态的各项光谱参数均有显著变化, 加场后蒽分子的吸收光谱发生了红移, 由紫外波段移向了紫外—可见光波段, 与实验值相符合. 分子前线轨道的计算结果也表明蒽分子的最高占据轨道 (highest occupied molecular orbital, HOMO) 和最低未占据轨道 (lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) 能量差值在不同电场下存在差异.

关键词: 蒽, 外电场, 激发特性

PACS: 31.15.-p, 31.15.ag

DOI: 10.7498/aps.62.073104

1 引言

近年来有机发光材料因为其良好的荧光量子效率, 载流子传输特性和良好的光学和热稳定性已经成为技术创新的重要方面, 特别是在有机发光器件 (OLED)^[1-4], 材料学和信息技术等方面具有强劲的竞争力. 1987年, Tang 和 VanSlyke 采用了超薄膜技术, 用透明导电玻璃 (ITO) 作阳极, 8-羟基喹啉铝 (Alq3) 作发光层, 三芳胺作空穴传输层, 镁铝合金 (Mg/Ag) 作阴极, 制成了双层小分子发光器件^[5]. 这对于有机电致发光材料来说具有伟大意义. 1990年, Burroughes 等人发现了以共轭高分子 PPV 为发光层的 OLED^[6], 从此在全世界范围内掀起了有机发光材料研究的热潮. 蒽 (anthracene) 是一种含三个苯环的多环芳香烃 (polycyclic aro-

matic hydrocarbons)^[7-9], 分子式 $C_{14}H_{10}$. 蒽的三个环的中心在一条直线上, 它的电致发光特性最早由 Pope^[10] 于 1963 年发现的, Pope 等人采用单晶蒽制备了有机电致发光器件, 由于单晶厚度达到 10—20 μm , 驱动电压高达 400 V 才能观察到微弱的蓝色荧光, 因此未能引起广泛关注. 到 1982 年 Vincett^[11] 小组用真空蒸镀法制成了 0.6 μm 厚的蒽薄膜, 实现了在 30 V 以下就能观察到蓝色荧光发射. 关于蒽及其衍生物的发光材料在实验上还在不断研究中, 可是利用量子化学方法从理论上研究蒽分子及其衍生物激发特性的文献很少见诸于报道. 发光来源于电子从高能级向低能级的辐射跃迁, 因而分子的激发态特性研究是有机材料发光的重要研究内容. 同时处于外电场下的有机分子, 由于受电场作用, 分子结构会发生改变, 而有机发光材料的发光性能与分子结构是密切相关的. 通

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274095)、河南省基础与前沿技术研究的计划 (批准号: 122300410109)、河南省高校青年骨干教师资助计划 (批准号: 2009GGJS-044)、河南省教育厅基础研究的计划 (批准号: 13A140550) 和河南师范大学国家级科研项目培育基金 (批准号: 2010PL02) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: xugliang@htu.cn

过调节外电场就可改变材料的分子结构,从而可以获得不同的发光性能.因此,本文采用密度泛函 B3P86/6-311G(d, p) 方法,对蒽分子在不同外电场下的稳定的基态结构进行优化,然后再用含时密度泛函 TD-DFT/B3P86/6-311G(d, p) 方法分别研究了不同外电场作用下蒽分子的激发态和前线轨道等方面的特性,以便为深入了解蒽及其衍生物在有机电致发光器件等相关领域的应用,并提高其发光效率提供有效的理论基础.

2 计算方法和原理

外场作用下多原子分子体系的哈密顿量可以描述为^[12]

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

其中, H_0 为无外场作用下分子体系的哈密顿量,而 H_{int} 为外电场与分子体系的相互作用项,既微扰项.在偶极近似情况下,外电场与分子体系的相互作用能为^[13]

$$H_{\text{int}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{F}, \quad (2)$$

其中, $\boldsymbol{\mu}$ 为分子的电偶极矩, \boldsymbol{F} 代表点电荷模型或者有限场模型下的电场强度.振子强度 f_{lu} 依赖激发能 E_{lu} 和跃迁偶极矩 $\boldsymbol{\mu}$, 可以表示成下式^[14]:

$$f_{\text{lu}} = \frac{8\pi^2 m}{3h^2 e^2} \times (E_u - E_l) \times |\boldsymbol{\mu}_{\text{lu}}|^2. \quad (3)$$

3 计算结果分析

3.1 无外场作用时蒽分子的激发特性

大部分共轭小分子都具有良好的共平面结构,单个蒽分子呈平面形状,其对称性属于 D_{2h} 点群.

本文利用密度泛函 B3P86 方法和 6-311G(d, p) 基组对蒽分子基态结构进行优化,得到其稳定构型 ($D_{2h}, {}^1A_g$) (图 1). 然后在此基态构型上利用含时密度泛函 TD-B3P86/6-311G(d, p) 方法计算蒽分子前十个单重激发态的激发能 E 、激发波长 λ 、振子强度 f 、跃迁偶极矩 $\boldsymbol{\mu}$ 等参数. 根据电子跃迁选择定则 $\Delta S = 0$, 基态和激发态的自旋多重度只有相同时才能发生跃迁, 否则跃迁是偶极禁戒的, 所以本文只考虑与基态在同一自旋多重度下的电子跃迁即分子单重激发态的激发特性. 同时对于 D_{2h} 群的分子, 根据直积规则 $B_{2g} \times B_{3u} = B_{1u}, B_{1g} \times B_{3u} = B_{2u}, A_u \times B_{1g} = B_{1u}, A_g \times B_{3u} = B_{3u}$, 即蒽分子基态电子吸收能量可以偶极跃迁到电子状态为 B_{1u}, B_{2u} 和 B_{3u} 的激发态. 据此, 从计算的蒽分子前十个激发态中选出可发生偶极跃迁的激发态, 其相应的电子状态、激发能、跃迁偶极矩等激发特性参数列于表 1 中. 同时根据计算得到的激发波长、振子强度等结果做出无外场作用下蒽分子的吸收光谱图 (图 2).

由表 1、图 2 可以看出, 无外场时的蒽分子激发波长在 234.5 nm 处有一个最大吸收峰, 380.75nm 处有一较小吸收峰, 这与实验值^[15] 符合得较好. 分子从基态到第 1, 2, 5, 8, 10 激发态均可以发生跃

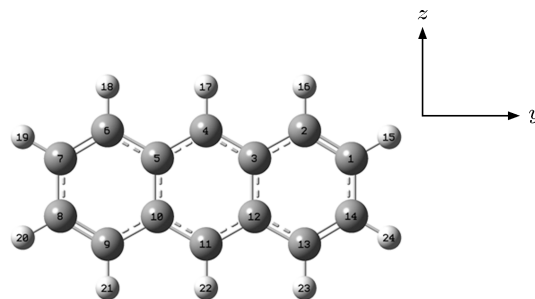


图 1 蒽 (anthracene) 分子的基态 (1A_g) 结构

表 1 TD-DFT/B3P86/6-311G(d, p) 方法获得的 anthracene 分子前十个激发态中可由基态偶极跃迁到的激发态的电子状态、激发能、跃迁类型以及跃迁偶极矩

分子	单态	跃迁	E_{ex}/eV	MO/特征	系数	$\boldsymbol{\mu}_{\text{lu}}$		
						X	Y	Z
Anthracene	$S_1({}^1B_{1u})$	$S_1 \leftarrow S_0$	3.2563	LUMO \leftarrow HOMO	0.700	0.0000	0.0000	-0.8475
	$S_2({}^1B_{2u})$	$S_2 \leftarrow S_0$	3.9140	LUMO \leftarrow HOMO-1	0.507	0.0000	0.0761	0.0000
				LUMO \leftarrow HOMO	0.491			
	$S_5({}^1B_{2u})$	$S_5 \leftarrow S_0$	5.2872	LUMO + 1 \leftarrow HOMO	0.509	0.0000	-3.8857	0.0000
	$S_8({}^1B_{1u})$	$S_8 \leftarrow S_0$	5.8745	LUMO + 1 \leftarrow HOMO - 1	0.656	0.0000	0.0000	-0.7591
$S_{10}({}^1B_{3u})$	$S_{10} \leftarrow S_0$	6.0282	LUMO \leftarrow HOMO - 5	0.702	-0.0253	0.0000	0.0000	

迁, 但激发特性存在较大差异. 比如电子从基态跃迁到第 5 激发态的振子强度 f 为 1.9558、跃迁偶极矩 μ 为 3.8857, 相对于基态的能量为 5.2872 eV, 对应吸收的光子波长为 234.50 nm, 电子是由分子的 HOMO 跃迁到 LUMO+1. 电子从基态跃迁到第 1 激发态对应 380.75 nm 处的吸收峰, 跃迁振子强度 f 为 0.0573, 跃迁偶极矩 μ 为 0.8475, 远小于第 5 激发态的相应数值. 对于第 10 激发态来说, 其跃迁矩阵元不为零, 所以即使其振子强度只有 0.0001, 电子也是可以从基态跃迁到第 10 激发态的, 跃迁类型为 LUMO \leftarrow HOMO - 5.

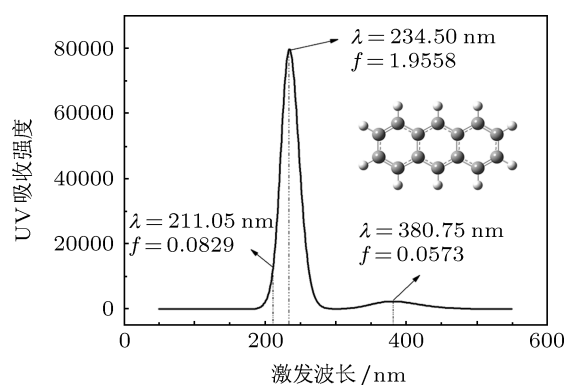


图2 无外场作用下蒽 (anthracene) 分子的吸收光谱

3.2 外场作用下蒽分子的激发特性

通过调节外电场可以改变材料的分子结构, 从而可以获得不同的发光性能, 对蒽分子及其衍生物等有机电致发光材料进行外电场下的分子激发特性的研究是一项很有必要的工作. 本文以密度泛函 B3P86/6-311G (d, p) 方法优化出的不同外电场下蒽分子基态结构为基础, 采用 TD-B3P86/6-311G (d, p) 方法, 分别计算了不同电场下蒽分子由基态跃迁到前十个激发态的激发能 E (图 3)、激发波长 λ 、振子强度 f , 计算结果列于表 2. 施加电场在蒽分子平面沿着 Z 轴方向, 电场强度大小依次为 0.020 a.u., 0.022 a.u., 0.024 a.u., 0.026 a.u., 0.028 a.u., 0.030 a.u., 0.032 a.u., 0.034 a.u., 0.036 a.u., 0.037 a.u., 0.038 a.u..

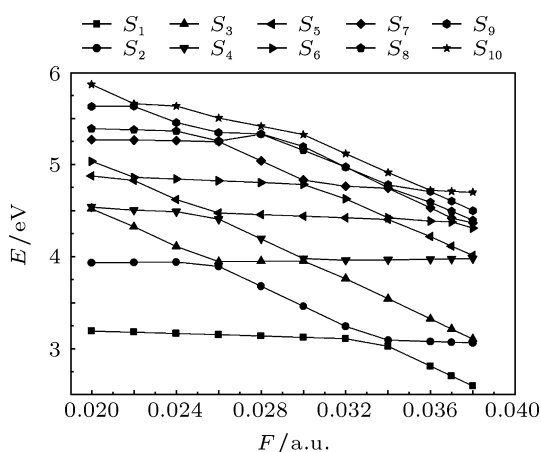
从表 2 计算结果可以得到如下结论: 加上外电场后蒽分子的电子结构和对称性均发生了变化, 由不加外电场的 D_{2h} 群变成了 C_{2v} 群, 相应的分子轨道的不可约表示也发生了变化. 外电场对激发态的激发波长和振子强度的影响是很复杂的: 在无外电场时, 由基态到第 1, 2, 5, 8, 10 激发态的跃迁振

子强度均不为零, 其中由基态跃迁到第 5 激发态跃迁振子强度为最大, 达到 1.9558. 在不同的外电场作用下, 振子强度 f 发生了显著的变化, 当电场在 0.020 a.u.—0.024 a.u. 范围内时, 第 5 激发态的振子强度全部变为零, 不能产生偶极跃迁, 而第 7 激发态跃迁振子强度是可跃迁的六个激发态中数值最大的, 达到 1.9 之多, 相应的吸收谱强度应该是最强的, 所对应的激发波长数值与已有实验值^[15] 范围相符合. 也可以看出加电场之后可发生偶极跃迁的激发态数目增加, 因而拓宽了蒽分子的激发波长范围; 另一方面随电场强度增大激发波长向可见光区发生红移, 例如对于第 1 激发态无场时吸收波长 380 nm 光子而当外加电场为 0.038 a.u. 时激发波长达到 478 nm, 波长增加接近 100 nm. 需要注意的是 1B_1 态是满足 C_{2v} 群的跃迁选择定则的, 只是由于计算得到的跃迁偶极矩数值很小才使得振子强度接近于零.

各激发态激发能随电场变化的趋势均在图 3 中有所体现: 外电场对蒽分子各激发态的激发能的影响较为复杂. 总体来说, 各激发态的激发能都是随着电场强度的增大而减小的, 个别激发态在某个电场强度下突然跳跃性的增大然后再随着电场强度的增大而减小. 例如, 第 1 激发态激发能随电场的增大到 0.032 a.u. 时开始显著减小; 第 2 激发态激发能随电场的增大到 0.026 a.u. 时开始显著减小; 第 3 激发态激发能随电场的增大到 0.024 a.u. 时呈现有规律的减小趋势, 而外电场在 0.026 a.u.—0.030 a.u. 区间时激发能基本保持不变, 电场从 0.026 a.u. 增大到 0.038 a.u. 时又开始呈现出有规律的减小; 而第 4 激发态在电场强度从 0.020 a.u.—0.026 a.u. 的过程中, 该激发态的激发能基本上没有多大的变化, 电场从 0.026 a.u. 增大到 0.030 a.u. 时依然呈现出有规律的减小, 而在 0.030 a.u.—0.038 a.u. 区间内激发态的激发能又保持一个平稳增大的趋势. 引起注意的是各激发态电子的跃迁轨道相应的随电场的变化发生一定变化. 例如, 无外场下第 5 激发态电子的跃迁轨道为 $49A_u \leftarrow 47B_{2g}$ (52%) (LUMO + 1 \leftarrow HOMO), 在 0.020 a.u. 时跃迁轨道为 $48B_1 \leftarrow 45A_2$ (33%) (LUMO \leftarrow HOMO - 2) 和 $51A_2 \leftarrow 47B_1$ (63%) (LUMO + 3 \leftarrow HOMO), 当电场增大到 0.030 a.u. 时跃迁轨道变为 $48B_1 \leftarrow 45A_2$ (63%) (LUMO \leftarrow HOMO - 2), 说明外电场对电子的跃迁轨道及相应电子状态有一定的影响.

表2 Z方向上施加外电场下蒽 (anthracene) 分子前十个激发态的激发波长 (λ)、振子强度 (f)

$F/\text{a.u.}$		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
		B_{1u}	B_{2u}	B_{3g}	B_{3g}	B_{2u}	B_{1u}	A_g	B_{1u}	A_g	B_{3u}
0.000	λ/nm	380.75	316.77	316.77	249.82	234.50	227.20	220.84	211.05	206.64	205.67
	f	0.0573	0.0006	0.0000	0.0000	1.9558	0.0000	0.0000	0.0829	0.0000	0.0001
		1A_1	1B_2	1B_2	1B_1	1B_2	1A_2	1B_2	1A_1	1A_1	1A_2
0.020	λ/nm	388.56	315.27	274.40	273.18	254.25	246.32	235.32	230.05	220.22	211.30
	f	0.0596	0.0009	0.0024	0.0001	0.0004	0.0000	1.9273	0.0000	0.0008	0.0000
		1A_1	1B_2	1B_1	1B_2	1A_2	1B_2	1B_2	1A_1	1B_1	1A_2
0.022	λ/nm	390.07	314.96	286.69	275.29	256.80	255.13	235.50	230.61	220.12	219.00
	f	0.0600	0.0009	0.0000	0.0024	0.0000	0.0003	1.9207	0.0000	0.0009	0.0000
		1A_1	1B_2	1B_1	1B_2	1A_2	1B_1	1B_2	1A_1	1A_2	1A_1
0.024	λ/nm	391.79	314.70	301.76	276.23	268.47	256.06	235.74	231.21	227.32	220.04
	f	0.0605	0.0010	0.0000	0.0024	0.0000	0.0003	1.9142	0.0000	0.0000	0.0009
		1A_1	1B_1	1B_2	1A_2	1B_2	1B_2	1A_2	1B_2	1A_1	1B_1
0.026	λ/nm	393.50	318.51	314.35	281.37	277.23	257.06	236.29	235.98	231.85	225.25
	f	0.0608	0.0000	0.0011	0.0000	0.0023	0.0003	0.0000	1.9065	0.0000	0.0041
		1A_1	1B_1	1B_2	1A_2	1B_2	1B_2	1A_1	1B_1	1B_2	1A_2
0.028	λ/nm	395.28	337.29	313.97	295.72	278.27	258.10	246.01	232.56	232.53	228.99
	f	0.0613	0.0000	0.0011	0.0000	0.0020	0.0002	0.0000	0.0042	0.0000	0.0000
		1A_1	1B_1	1B_2	1A_2	1B_2	1B_2	1A_2	1B_1	1A_2	1B_1
0.030	λ/nm	397.12	358.45	313.56	311.75	279.35	259.20	256.55	240.60	238.73	232.87
	f	0.0618	0.0000	0.0012	0.0000	0.0018	0.0001	0.0000	0.0043	0.0000	0.0003
		1A_1	1B_1	1A_2	1B_2	1B_2	1A_2	1B_2	1B_1	1A_2	1B_1
0.032	λ/nm	399.01	382.44	329.74	313.14	280.45	268.01	260.33	249.45	249.36	242.25
	f	0.0620	0.0000	0.0000	0.0014	0.0015	0.0000	0.0001	0.0043	0.0000	0.0003
		1B_1	1A_1	1A_2	1B_2	1B_2	1A_2	1B_2	1A_2	1B_1	1B_1
0.034	λ/nm	409.88	401.12	350.13	312.76	281.63	280.45	261.52	260.98	259.34	252.42
	f	0.0000	0.0624	0.0000	0.0015	0.0011	0.0000	0.0000	0.0000	0.0043	0.0003
		1B_1	1A_1	1A_2	1B_2	1A_2	1B_2	1A_2	1B_1	1B_1	1B_2
0.036	λ/nm	441.42	403.09	373.17	312.31	294.08	282.77	273.74	270.17	263.52	262.70
	f	0.0000	0.0626	0.0000	0.0016	0.0000	0.0008	0.0000	0.0042	0.0003	0.0000
		1B_1	1A_1	1A_2	1B_2	1A_2	1B_2	1A_2	1B_1	1B_1	1B_2
0.037	λ/nm	459.02	404.07	385.88	312.08	301.38	283.35	280.59	276.01	269.44	263.28
	f	0.0000	0.0627	0.0000	0.0017	0.0000	0.0006	0.0000	0.0042	0.0004	0.0001
		1B_1	1A_1	1A_2	1B_2	1A_2	1A_2	1B_2	1B_1	1B_1	1B_2
0.038	λ/nm	478.03	405.06	399.48	311.85	309.02	287.79	283.92	282.17	275.64	263.91
	f	0.0000	0.0627	0.0000	0.0017	0.0000	0.0000	0.0005	0.0041	0.0004	0.0001

图3 外电场对蒽 (anthracene) 分子的激发能 E 的影响

3.3 外电场对蒽分子前线轨道能级的影响

对于蒽分子, 我们利用 DFT/B3P86/6-311G(d, p) 计算出了它的最高占据轨道能量 (E_{HOMO}) 为 -6.13 eV, 最低空轨道能量 (E_{LUMO}) 为 -2.54 eV, 能隙 (E_{gaps}) 为 3.59 eV, 这与实验值^[16] 和文献^[17] 都符合得较好. HOMO 和 LUMO 能隙差的大小反映了电子从占据轨道跃迁到空轨道的能力. 计算发现不同外电场下蒽分子的最高占据轨道能量 (E_{HOMO}), 最低空轨道能量 (E_{LUMO}) 和能隙 (E_{gaps}) 都是呈有规律的变化, 本文选取了离前线轨道 HOMO 和 LUMO 最近的几个轨道做出蒽分子前线轨道与外电场之间的关系图 (图 4). 由图 4 可以看出, 随着电场的增大, 能隙在逐渐的减小, 电子更加容易的从最高占据轨道跃迁到最低未占据轨道.

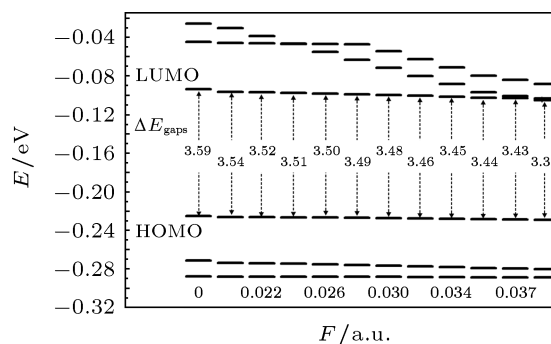


图4 外电场对蒽 (anthracene) 分子前线轨道能级的影响

4 结论

本文采用 TD-B3P86 方法研究了外电场情况下蒽分子的激发特性, 结果表明外电场对蒽分子的分子能级分布, 吸收光谱均有一定的影响. 在无电场的情况下吸收光谱的吸收峰出现在紫外光区 234.5 nm 处, 外电场的作用下, 蒽分子基态点群由 D_{2h} 群变成了 C_{2v} 群, 蒽分子的吸收谱变化比较明显, 施加外电场一方面有效拓宽了蒽分子吸收谱范围, 另一方面吸收峰随着电场的增大出现了显著红移现象, 吸收谱从原来的只在紫外区扩展到紫外—可见光区, 说明了外电场对蒽分子电致发光的显著影响. 外场作用下分子的能隙也发生了变化, 无外电场时 E_{gaps} 为 3.59 eV, 随着电场的增大 HOMO 和 LUMO 之间的能量差变得越来越小, 说明在外电场作用下电子越来越容易从 HOMO 跃迁到 LUMO. 该研究结果对研究有机发光材料的发光机理上有一定的参考作用, 也有利于进一步研究通过施加外电场调节其他稠环芳香烃的发光特性.

- [1] Zhang Y F, Forrest S R 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 267404
- [2] Su Y J, Wu X M, Hua Y L, Shen L Y, Jiao Z Q, Dong M S, Yin S G 2012 *Chin. Phys. B* **21** 058503
- [3] Duan Y, Chen P, Zhao Y, Liu S Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 077805 (in Chinese) [段羽, 陈平, 赵毅, 刘式堉 2011 物理学报 **60** 077805]
- [4] Müllen K, Scherf U 2006 *Organic light emitting devices*. Editor (Wiley Online Library).
- [5] Tang C W, VanSlyke S A 1987 *Appl. Phys. Lett.* **51** 913
- [6] Burroughes J, Bradley D, Brown A, Marks R, Mackay K, Friend R, Burns P, Holmes A 1990 *Nature* **347** 539
- [7] Howsam M, Jones K C, Ineson P 2001 *Environ. Pollut.* **113** 163
- [8] Harvey R G 1991 *Polycyclic aromatic hydrocarbons: Chemistry and Carcinogenicity* (Cambridge University Press)
- [9] Alparone A, Librando V, Minniti Z 2008 *Chem. Phys. Lett.* **460** 151
- [10] Pope M, Kallmann H, Magnante P 1963 *J. Chem. Phys.* **38** 2042
- [11] Vincett P, Barlow W, Hann R, Roberts G 1982 *Thin Solid Films* **94** 171
- [12] Xu G L, Xie H X, Yuan W, Zhang X Z, Liu Y F 2012 *Chin. Phys. B* **21** 053101
- [13] Cooper G, Olney T N, Brion C 1995 *Chem. Phys.* **194** 175
- [14] Xu G L, Xie H X, Yuan W, Zhang X Z, Liu Y F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 043104 (in Chinese) [徐国亮, 谢会香, 袁伟, 张现周, 刘玉芳 2012 物理学报 **61** 043104]
- [15] Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) Data Base, Jinno Laboratory (Japan) <http://chrom.tutms.tut.ac.jp/JINNO/DATABASE/02anthracene.html> [2012-10-11]
- [16] Fedorov I A, Zhuravlev Y N, Berveno V P 2011 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 5679
- [17] Wang Y, Chen J W, Li F, Qin H, Qiao X L, Hao C 2009 *Chemosphere* **76** 999

Effects of external electric field on the excitation properties of anthracene molecule*

Xu Guo-Liang[†] Yuan Wei Geng Zhen-Duo Liu Pei Zhang Lin
Zhang Xian-Zhou Liu Yu-Fang

(College of Physics & Electronic Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

(Received 11 October 2012; revised manuscript received 21 November 2012)

Abstract

The theoretical investigations on the molecular energy levels, energy gaps, and the singlet–singlet electronic excitation properties (such as absorption spectra, excited energy, oscillator strengths) of the anthracene molecule in different external electric field were carried out by employing density functional theory (DFT) and time-dependent density functional theory (TDDFT) method with 6-311G(d, p) basis set. The stable molecular structure in ground state was optimized by DFT. The calculated results show that the absorption bands of anthracene molecule concentrate in ultraviolet region without external electric field, the absorption peak of which corresponds to the $S_0 \rightarrow S_5$ transitions with an excitation wavelength of 234.5 nm. The calculated absorption spectra agree well with the experimental data. Moreover, it is noticeable that the effects of the external electric field on optical properties cannot be neglected. The ultraviolet absorption spectra of anthracene molecule show a red shift into the blue-light region with the increases of electric field intensity. At the same time, the energy gaps between LUMO and HOMO for the anthracene molecule decrease with the increase of external electric field intensity. It can be shown that the anthracene molecule is promising as a useful blue-light emitting material through modulating by an electric field.

Keywords: anthracene, external electric field, excitation properties

PACS: 31.15.–p, 31.15.ag

DOI: 10.7498/aps.62.073104

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11274095), the Natural Science Foundation of Henan Province, China (Grant No. 122300410109), the Foundation for University Young Core Instructors of Henan Province, China (Grant No. 2009GGJS-044), the Basic Research Program of the Education Bureau of Henan Province, China (Grant No. 13A140550), the Cultivating Fund of Henan Normal University, China (Grant No. 2010PL02).

[†] Corresponding author. E-mail: xugliang@htu.cn