

研究论文

Au的乙炔配合物非线性光学性质的量子化学计算

曾薇 丁涪江\* 赵可清

(四川师范大学化学与材料科学学院 成都 610066)

收稿日期 2008-1-24 修回日期 2008-3-28 网络版发布日期 2008-10-22 接受日期 2008-5-13

摘要

对过渡金属Au的有机配合物 $\text{Ph}_3\text{PAu-C}\equiv\text{CR}$  ( $\text{R}=\text{C}_6\text{H}_4\text{OCH}_3$ ,  $\text{Ph}$ ,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2$ 和 $\text{PyNO}_2$ )的极化率和一阶、二阶超极化率进行了量子化学计算. 构型在B3LYP/CEP-121G水平优化. 用有效模型势方法和二阶多体微扰方法分别考虑了相对论效应和电子相关效应. 对基组进行了慎重的选择, 以ECP-HYPOL基组为对照标准, 在LFK基组基础上简化得到一个较小的基组LFK2. 计算结果与实测结果趋势一致.

关键词

[Au配合物](#) [非线性光学性质](#) [基组](#) [从头算](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

丁涪江 [fjding@mail.sc.cninfo.net](mailto:fjding@mail.sc.cninfo.net)

作者个人主页:

曾薇 丁涪江\* 赵可清

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(307KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献 \[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含 “  
Au配合物” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- [曾薇, 丁涪江, 赵可清](#)