

引用信息: QIU Yong-Qing; LIU Chun-Guang; CHEN Hui; SU Zhong-Min; YANG Guo-Chun; WANG Rong-Shun. Acta Phys. -Chim. Sin., 2006, 22(07): 836-839 [仇永清; 刘春光; 陈徽; 苏忠民; 杨国春; 王荣顺. 物理化学学报, 2006, 22(07): 836-839]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

具有三维结构的Co(II)配合物二阶非线性光学性质的DFT研究

仇永清; 刘春光; 陈徽; 苏忠民; 杨国春; 王荣顺

东北师范大学化学学院, 功能材料化学研究所, 长春 130024

摘要:

以实验合成出的Schiff碱配体和Co(II)配合物为母体, 设计了Schiff碱配体和具有三维结构的Co(II)配合物. 采用密度泛函理论的 B3LYP/6-31g(d)-FF方法对具有开壳层电子组态Co(II)配合物及相应配体的二阶非线性光学(NLO)效应进行了计算. 结果表明: Schiff碱配体形成配合物后分子的二阶NLO性质没有发生大的改变, 这是由于金属Co²⁺离子在配合物电荷转移(CT)过程中起到了桥的作用, 对分子的二阶NLO响应直接贡献不大. 结合配合物的前线分子轨道分析发现, 在分子内电荷转移过程中, 对分子二阶NLO系数的主要贡献是配体内电荷转移(ILCT)跃迁.

关键词: Co(II)配合物 Schiff碱配体 非线性光学系数 密度泛函理论(DFT)

收稿日期 2005-12-20 修回日期 2006-03-23 网络版发布日期 2006-06-27

通讯作者: 仇永清 Email: qiuyq466@nenu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(514KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ Co(II)配合物

▶ Schiff碱配体

▶ 非线性光学系数

▶ 密度泛函理论(DFT)

本文作者相关文章

▶ 仇永清

▶ 刘春光

▶ 陈徽

▶ 苏忠民

▶ 杨国春

▶ 王荣顺