

不对称二苯乙炔系列衍生物的二阶非线性光学性质的ZINDO-SOS研究

付伟,封继康,任爱民,崔劭,孙秀云,李耀先

吉林大学理论化学研究所,长春(130023);吉林大学理论化学计算国家重点实验室;

吉林大学超分子结构及谱学开放实验室;吉林大学化学系,长春(130023)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在ZINDO方法基础上,按完全态求和(SOS)公式编制了计算分子二阶非线性光学系数 β_{i-j-k} , β_{μ} 的程序;研究了不对称二苯乙炔系列衍生物的结构和非线性光学性质;计算了不对称二苯乙炔系列衍生物的UV光谱,偶极矩, β_{μ} , $\beta_{\mu-0}$, $\mu\beta_{\mu-0}$,及激发态电荷转移;考察了分子共轭链长、给电子基团对 β_{μ} 的影响。并对上述结果在微观上给予了解释。

关键词 [二苯乙炔](#) [非线性光学](#) [电荷转移](#) [国家教委高等学校博士学科点专项科研基金](#)

分类号 [0641](#)

A ZINDO-SOS study on nonlinear second-order optical properties of unsymmetric bis(phenylethynyl) benzene series derivatives

Fu Wei,Feng Jikang,Ren Aimin,Cui Meng,Sun Xiuyun,Li Yaoxian

Jilin Univ, Inst Theoret Chem.Changchun(130023);Jilin Univ, Dept Chem.Changchun(130023)

Abstract On the basis of ZINDO methods using the sum-over-states expression, we have devised the program for the calculation of nonlinear second-order optical susceptibilities β_{i-j-k} and β_{μ} of molecules, and studied the structures and nonlinear optical properties of unsymmetric bis(phenylethynyl) benzene series derivatives. The UV-spectrum, μ , β , $\mu\beta$, $\beta_{\mu-0}$, $\mu\beta_{\mu-0}$, and the charge-transfer of excited state of unsymmetric bis(phenylethynyl) benzene series derivatives were calculated. The influence of the molecular conjugated chain length and the electron-donating group on β_{μ} was examined. Microscopic explanations for the calculated results are given.

Key words [TOLANE \(=DIPHENYLACETYLENE\)](#) [NON LINEAR OPTICS](#) [CHARGE TRANSFER](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(416KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“二苯乙炔”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [付伟](#)
- [封继康](#)
- [任爱民](#)
- [崔劭](#)
- [孙秀云](#)
- [李耀先](#)