

有限场方法研究环丁烯-1,2-二酮衍生物的非线性光学性质

孙泽民,王兵,田安民,鄢国森

四川联合大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文利用有限场/PM3方法计算了环丁烯-1,2-二酮衍生物的偶极矩、极化率、一阶超极化率和二阶超极化率,说明这类化合物是很好的非线性光学材料。

关键词 [光学性质](#) [偶极矩](#) [非线性材料](#) [极化率](#) [环丁烯二酮](#) [有限场方法](#)

分类号 [0644](#)

Finite field study of nonlinear optical properties of cyclobutene-1,2-dione derivatives

SUN ZEMIN,WANG BING,TIAN ANMIN,YAN GUOSEN

Abstract Finite field/PM3 calculations of the dipole moments, polarizabilities, first-order hyperpolarizabilities and second-order hyperpolarizabilities of cyclobutene-1,2-dione derivatives suggest that these compounds are good candidates for nonlinear optical materials.

Key words [OPTICAL PROPERTIES](#) [DIPOLE MOMENTS](#) [NON-LINEAR MATERIALS](#) [POLARIZABILITIES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(274KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“光学性质”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [孙泽民](#)
- [王兵](#)
- [田安民](#)
- [鄢国森](#)