

若干有机共轭分子二阶非线性光学系数和结构的关系

袁爱华,沈小平,陈文健

华东船舶工业学院焊接与材料工程系;镇江师范专科学校化学系;扬州大学师范学院化学系.扬州

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 利用CNDO/S-CI程序计算了四类结构近似的有机共轭分子的二阶非线性光学系数,系统地研究了分子结构、共轭链链长、取代基的电子性质、

取代位置等对有机共轭大分子二阶非线性光学性质的影响。研究表明,

四类化合物的二阶非线性光学性质与其分子结构有着密切的关系。

**关键词** [二阶](#) [非线性光学系数](#) [倍频效应](#) [共轭\(化学键\)](#) [二苯乙烯](#) [二苯基甲酮](#) [查耳酮](#) [二苯基戊二烯酮](#) [极化率](#)

分类号 [0621.16](#)

## The structure dependence of the second-order nonlinear optical polarizabilities of some conjugated organic molecules

Yuan Aihua, Shen Xiaoping, Chen Wenjian

Yangzhou Univ. Yangzhou

**Abstract** In this paper, we have calculated the second-order nonlinear optical polarizabilities of four kinds of organic conjugated systems by using the CNDO/S-CI quantum chemical calculation program. The effects of the molecular structure, the molecular length, the electronic properties of substituents and the location of the substitution on the values of  $\beta_{vec}$  of these molecules have been studied. The results reveal that there is a close relationship between the structure and the value of  $\beta_{vec}$ .

**Key words** [TWO-ORDER](#) [FREQUENCY EFFECT](#) [CONJUGATE](#) [STYRYL KETONE](#) [DIPHENYLMETHANONE](#) [CHALCONE](#) [DIPHENYL GROUP](#) [POLARIZABILITIES](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(268KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“二阶”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [袁爱华](#)

· [沈小平](#)

· [陈文健](#)