

若干有机共轭分子三阶非线性光学系数和链长的关系

封继康,高旭岭,孙家钟

吉林大学化学系;吉林大学理论化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 我们以INDO/SDCI方法为基础,利用完全态求和公式,计算了多烯烃和联苯类分子的三阶非线性光学系数 $\gamma(0,0,0,0)$ 和 $\gamma(-\omega,\omega,-\omega,\omega)$ 。研究了 $\gamma$ 与共轭分子链长的关系及其与外场频率的关系,认为在链不十分长时 $\gamma$ 与链长的三次方成正比。 $\gamma$ 的大小微观上与电子的离域作用有关。

**关键词** [多烯烃](#) [链长](#) [相互关系](#) [联苯](#) [光学系数](#) [共轭分子](#) [完全态求和公式](#)

分类号 [0641](#)

## The length dependence of the nonlinear third-order optical susceptibilities of some conjugated organic molecules

FENG JIKANG,GAO XULING,SUN JIAZHONG

**Abstract** On the basis of INDO/SDCI method, using sum-over-states formula, the nonlinear 3rd-order optical susceptibilities  $g(0,0,0,0)$  and  $g(-\omega,-\omega,-\omega,-\omega)$  of polyenes and poly-p-phenyls were calculated. The mol. length dependence and the effect of frequency of external field for  $g$  showed that  $g(0,0,0,0)$  were proportional to the third-power of the lengths, within a certain range, and was relevant to the electronic delocalization in micromechanism.

**Key words** [POLYENE](#) [CHAIN LENGTH](#) [CORRELATIONS](#) [XENENE](#) [CONJUGATED MOLECULE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“多烯烃”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [封继康](#)

· [高旭岭](#)

· [孙家钟](#)