

论文
配位数与电子化物的一阶超极化率的碱金属原子序数依赖性

徐红亮¹, 李志儒¹, 吴迪¹, 陈巍², 于广涛², 王钦¹

1. 吉林大学理论化学研究所, 理论计算化学国家重点实验室, 长春 130021;
2. 日本九州大学分子材料学院, 福岡816-8580

摘要:

用MP2方法得到单配位电子化物M—X(M=Li, Na, K; X=NH₃, NCH, HF)和二配位电子化物M—(FH)₂(M=Li, Na, K)的几何结构. 使用高水平的QCISD/6-311++G(3df, 3pd)计算了它们的一阶超极化率 β_0 . 在单配位的电子化物中, 单调的一阶超极化率的碱金属原子序数依赖性未表现出来, 而二配位电子化物 M—(FH)₂(M=Li, Na, K)的 β_0 值随着碱金属原子序数的增加而增加, 这与文献报道的四配位相关体系的情况一致. 这表明, 电子化物中配位数与一阶超极化率碱金属原子序数依赖性相关.

关键词: 电子化物 依赖性 超极化率

Whether the Coordination Number Influence Dependence of Static First Hyperpolarizability on the Atomic Number of Alkali Metal

XU Hong-Liang¹, LI Zhi-Ru^{1*}, WU Di¹, CHEN Wei², YU Guang-Tao², WANG Qin¹

1. State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry Jilin University, Changchun 130021, China;
2. Department of Molecular and Material Sciences, Faculty of Engineering Sciences, Kyushu University, Fukuoka 816-8580, Japan

Abstract:

Using the MP2 method, the optimized structures of the one-coordination M—X(X=NH₃, NCH, HF) and two-coordination M—(FH)₂(M=Li, Na, K) with all real frequencies were calculated. Further, their static first hyperpolarizabilities(β_0) were studied by QCISD/6-311++G(3df, 3pd) level. The dependence of β_0 on the atomic number of alkali metal(M) is not monotonic in these one-coordination electriles. However, the dependence of β_0 value on the atomic number of alkali metal was observed in the two-coordination electriles M—(FH)₂(M=Li, Na, K), the dependence is accorded with that of reported four coordination related systems. These results show that the dependence of β_0 value on the atomic number of alkali metal is related to coordination number.

Keywords: Electride Dependence Hyperpolarizability

收稿日期 2008-03-10 修回日期 网络版发布日期 2009-04-10

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20573043, 20773046, 20503010)和日本科学技术振兴会资助.

通讯作者: 李志儒, E-mail: lizr@jlu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

1. Eaton D. F.. Science[J], 1991, 253: 281—287
2. Cheng W. D., Xiang K. H., Pandey R., et al.. J. Phys. Chem. B[J], 2000, 104: 6737—6742

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(247KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao} KB\)](#)

参考文献[PDF]

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

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

▶ 电子化物

▶ 依赖性

▶ 超极化率

本文作者相关文章

▶ 徐红亮

▶ 李志儒

▶ 吴迪

▶ 陈巍

▶ 于广涛

▶ 王钦

PubMed

Article by Xu G. L.

Article by Li Z. R.

Article by Wu D.

Article by Chen W.

Article by Yu G. T.

Article by Wang Q.

3. Ichida M., Sohda T., Nakamura A.. J. Phys. Chem. B[J], 2000, 104: 7082—7084
4. Geskin V. M., Lambert C., Brédas J. L.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2003, 125: 15651—15658
5. Nakano M., Fujita H., Takahata M., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 2002, 124: 9648—9655
6. Long N. J., Williams C. K.. Angew. Chem. Int. Ed.[J], 2003, 42: 2586—2617
7. Kirtman B., Champagne B., Bishop D. M.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2000, 122: 8007—8012
8. Marder S. R., Torruellas W. E., Blanchard-Desce M., *et al.* Science[J], 1997, 276: 1233—1236
9. Avramopoulos A., Reis H., Li J., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 2004, 126: 6179—6184
10. Li Y., Li Z. R., Wu D., *et al.* J. Phys. Chem. B[J], 2004, 108: 3145—3148
11. Chen W., Li Z. R., Wu D., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 2005, 127: 10977—10981
12. Chen W., Li Z. R., Wu D., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 2006, 128: 1072—1073
13. Jing Y. Q., Li Z. R., Wu D., *et al.* Chem. Phys. Chem.[J], 2006, 7: 1759—1763
14. Chen W., Li Z. R., Wu D., *et al.* J. Phys. Chem. B[J], 2005, 109: 601—608
15. Xu H. L., Li Z. R., Wu D., *et al.* J. Am. Chem. Soc.[J], 2007, 129: 2967—1970
16. SUN Xiao-Ying(孙晓颖), LI Zhi-Ru(李志儒), WU Di(吴迪), *et al.* Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2007, 28(6): 1110—1112
17. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., *et al.* Gaussian 03, Revision B03[CP], Wallingford CT: Gaussian Inc., 2004
18. Oudar J. L., Chemla D. S.. J. Chem. Phys.[J], 1977, 66: 2664—2668

本刊中的类似文章

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
					META http-equiv=Content-Type content="text/html" charset=utf-8 Appreciation for the star heels