

双咪唑苯和双三唑苯及其衍生物非线性光学性质的密度法函研究

刘海波, 仇永清, 孙世玲, 孙晓娜, 苏忠民

东北师范大学化学学院, 功能材料化学研究所, 长春 130024

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)的UB3LYP(B3LYP)/6-31+G\*\*方法对双咪唑苯和双三唑苯双自由基及其衍生物几何结构进行优化, 并结合有限场(FF)方法计算这些体系的非线性光学(NLO)系数. 结果表明, 引入给受体取代基都能使体系的极化率 $\alpha$ 和二阶超极化率 $\chi$ 增大. 在双自由基体系中, 引入给体NH<sub>2</sub>和NO<sub>2</sub>的, 在闭壳层体系中结果相反. 通过分析自由基成分和电荷对体系的二阶超极化率 $\chi$ 的影响, 表明处于中间双自由基成分分子比相似共轭性的闭壳层分子有更大的二阶超极化率 $\chi$ ; 带电荷的双自由基体系引入给受体之后, 与中性自由基体系相比具有更大的二阶超极化率 $\chi$ .

关键词: 双自由基 非线性光学(NLO)系数 自由基成分 DFT

收稿日期 2009-06-22 修回日期 2009-08-22 网络版发布日期 2009-11-06

通讯作者: 仇永清 Email: qiuyq466@nenu.edu.cn

#### 本刊中的类似文章

1. 陈丽涛;陈光巨;傅孝愿. 氟、胺取代基对乙烯和甲醛环加成的影响[J]. 物理化学学报, 1994,10(08): 680-685
2. 胡海泉;刘成卜. 双自由基CF<sub>2</sub>与O<sub>3</sub>的反应机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(12): 1104-1107
3. 马思渝;丁燕波;傅孝愿. 咪唑与单线态氧(<sup>1</sup>O<sub>2</sub>)1,2-环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 181-185