

半花菁衍生物分子非线性光学性质的理论研究

李海鹏; 韩奎; 王群

中国矿业大学理学院, 徐州 221008; 徐州师范大学物理系, 徐州 221116

摘要:

采用有限场(FF)/PM3方法对半花菁衍生物的第一超极化率和分子前线轨道性质进行了计算. 结果表明, 半花菁衍生物分子的第一超极化率主要与D- π -A结构有关, σ -烷基链对分子第一超极化率的影响很小, 并且分子第一超极化率与分子前线轨道HOMO和LUMO能级差 ΔE_{HL} 呈较好的线性关系.

关键词: 非线性光学 半花菁 第一超极化率(β) 分子前线轨道

收稿日期 2004-01-12 修回日期 2004-03-15 网络版发布日期 2004-08-15

通讯作者: 韩奎 Email: han6409@263.net

本刊中的类似文章

1. 王树军; 罗代兵; 阮文娟; 朱志昂; 马毅. 手性锌卟啉的非线性光学性质及对咪唑类客体分子识别的构象研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 834-839
2. 游晓莉; 徐布一; 李权; 赵可清. 噻唑类生色分子的电子光谱和非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 314-318
3. 田中群; 孙世刚; 罗瑾; 杨勇. 现场光谱电化学研究的新进展[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 860-866
4. 王大文; 叶成; 赵建良; 白春礼. 有机非线性光学晶体NPP的AFM研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 172-174
5. 郑吉民; 车云霞; 王如骥; 王宏根. 甘氨酸与间硝基苯甲酸加合物的合成及晶体结构[J]. 物理化学学报, 1994, 10(01): 64-68
6. 吴爱玲; 赵显; 关大任; 易希璋. 取代苯体系的二阶非线性光学性质: 动力学李代数方法[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1319-1323
7. 张振江; 路建美; 周为群; 祁秀秀. 聚酰胺酸及其接枝衍生物的二阶非线性光学性能研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(07): 711-715
8. 朱培旺; 王传广; 王鹏; 叶成. 溶剂化变色法测定有机分子 β 的若干问题[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 369-374
9. 王树军; 章应辉; 阮文娟; 罗代兵; 朱志昂; 田建国; 刘智波. 新型手性基团修饰的金属卟啉的合成及性质研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(08): 981-986
10. 李晓东. C₅₀富勒烯及其二聚物C₁₀₀、C₁₀₁的光学性质[J]. 物理化学学报, 2007, 23(11): 1792-1796
11. 王洪涛; 韩奎; 李艳. [Li...X]e⁻¹(X=FH, OH₂, NH₃)的光电性质从头算[J]. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1468-1472
12. 李富友; 郑杰; 柳汀汀; 金林培; 赵新生; 郭建权. “推拉”型希夫碱染料的光化学和光电化学性质[J]. 物理化学学报, 2000, 16(09): 787-791
13. 仇永清; 刘春光; 陈徽; 苏忠民; 杨国春; 王荣顺. 具有三维结构的Co(II)配合物二阶非线性光学性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 836-839
14. 杨英; 龚楚清; 肖思; 龚红梅; 王取泉; 钟家桢. TiO₂浓度对核-壳结构Ag/TiO₂纳米复合粒子结构以及三阶非线性光学性质的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 791-796
15. 赵波; 张道; 曹阳; 陈文建; 孙真荣; 王祖庚. 几种查耳酮的二阶非线性光学性质解析[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 422-425
16. 杨明理; 孙泽民; 鄢国森. 聚脲分子的非线性光学极化率[J]. 物理化学学报, 1999, 15(08): 693-697
17. 李宏波; 韩峰; 陈慧英; 羌笛; 王树峰; 黄文涛; 龚旗煌. C₆₀蒴胺类衍生物的合成及三阶非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 1999, 15(11): 971-975
18. 曹阳; 赵波; 左涛. 肉桂酸类分子非线性光学效应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(07): 594-597
19. 周钰明; 钟爱民; 何曼; 崔一平; 张彤. PUT/SiO₂复合材料的制备与表征[J]. 物理化学学报, 2007, 23(02): 223-227

扩展功能

本文信息

PDF(1665KB)

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

▶ 非线性光学

▶ 半花菁

▶ 第一超极化率(β)

▶ 分子前线轨道

本文作者相关文章

▶ 李海鹏

▶ 韩奎

▶ 王群