

二乙炔及其衍生物的聚合和光学性能的量子化学研究

陈光巨,黄元河,徐洪耀,余从焯

北京师范大学化学系;北京理工大学化工与材料学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 主要报道利用半经验分子轨道方法PM3研究的五个二乙炔衍生物的结构,并预计了其分子晶体的光学和聚合性能。这些化合物的几何构型参数以及由此形成的晶体的堆积参量均用能量梯度方法优化。同时,从实验上研究了其中三个化合物的晶体在热和光环境下的聚合状况。理论预计和实验结果基本吻合。计算表明,可聚合晶体应具有适当的堆积距 d ($\sim 0.55\text{nm}$)和倾斜角 θ ($\sim 50^\circ$)。

关键词 [光学性质](#) [聚合](#) [非线性光学材料](#) [半经验分子轨道方法](#) [其它基金](#) [二乙炔 P](#) [国家863项目资助基金](#)

分类号 [0641](#)

The quantum chemical study on optical and polymeric properties of diacetylene derivatives

CHEN GUANGJU, HUANG YUANHE, XU HONGYAO, YU CONGXUAN

Abstract In the present work, the optical and polymeric properties of five diacetylene derivatives have been studied by using semi-empirical molecular orbital method PM3. The geometries of these molecules and the stacking parameters (d and θ) of their crystal are optimized with energy gradients. At the same time, the polymerizability of three of these molecules at high temperature or/and UV light conditions have also been studied experimentally. The results of the calculations show that the crystal can polymerize when there are the proper stacking distance ($d \approx 0.55\text{nm}$) and angle of inclination ($\theta \approx 50^\circ$).

Key words [OPTICAL PROPERTIES](#) [POLYMERIZATION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(503KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“光学性质”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [陈光巨](#)

· [黄元河](#)

· [徐洪耀](#)

· [余从焯](#)