

化学

含不同二硫醇盐的Pt(Ⅱ)吡啶三嗪配合物的二阶NLO性质

赵岷, 李作盛, 张元, 王璐

渤海大学 化学化工学院, 辽宁 锦州 121000

摘要:

采用量子化学DFT B3LYP/LanL2DZ+6\|31G \*方法, 研究不同二硫醇盐的Pt(Ⅱ)吡啶-三嗪配合物的二阶非线性光学(NLO)性质. 结果表明: 配合物中配位原子间的距离与S=C共轭链长度密切相关; 在4种配合物中, 吡啶和三嗪部分表现出给电子特性, 二硫醇盐部分具有吸电子作用; 金属Pt(Ⅱ)可作为给电子的共轭桥, 4种配合物的偶极矩 μ和极化率α 成正比. NLO效应研究表明, 4种配合物均具有较大的 β<sub>tot</sub> 值, 可以作为潜在的NLO材料.

关键词: Pt(Ⅱ)配合物; 密度泛函理论(DFT); 二阶非线性光学(NLO)性质

Second Order Nonlinear Optical Properties of Pt(Ⅱ) Pyridine and Triazine Complexes with Different Dithiolate

ZHAO Min, LI Zuo sheng, ZHANG Yuan, WANG Lu

College of Chemistry and Chemical Engineering, Bohai University, Jinzhou 121000, Liaoning Province, China

Abstract:

DFT B3LYP/LanL2DZ+6\|31G \* method was adopted to investigate the second order NLO properties of pyridine triazine Pt(Ⅱ) complexes with different dithiolates. The calculation results show that the bond distance between coordinating atoms is related to the length of S CDS1 C conjugate chain. In the four complexes, the pyridine and triazine parts play the electron donating role. Rather, the dithiolate part shows the ability to pull electrons. Metal Pt serves as a conjugate bridge of electron donor. The dipole moment μ of the complexes vary directly with the polarizability α . The four complexes have big β<sub>tot</sub> values and would act as the potential NLO materials.

Keywords: Pt(Ⅱ) complex density functional theory(DFT) second order nonlinear optical (NLO) property

收稿日期 2010-06-12 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 赵岷

作者简介:

作者Email: lnzhaomin@163.com

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF(413KB)
- [HTML全文]
- 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

- Pt(Ⅱ)配合物; 密度泛函理论
- (DFT); 二阶非线性光学(NLO)性质

本文作者相关文章

- 赵岷
- 李作盛
- 张元
- 王璐

PubMed

- Article by Diao, M.
- Article by Li, Z. C.
- Article by Zhang, Y.
- Article by Wang, L.

|             |                      |      |                      |
|-------------|----------------------|------|----------------------|
| 反<br>馈<br>人 | <input type="text"/> | 邮箱地址 | <input type="text"/> |
|-------------|----------------------|------|----------------------|

反  
馈  
标  
题

验证码

6727