

研究论文

14 顶点双取代碳硼烷和金属硼烷极化率和二阶超极化率的 DFT 研究

樊敏 仇永清* 孙世玲 刘晓东 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

收稿日期 2008-10-7 修回日期 2008-12-3 网络版发布日期 2009-6-14 接受日期 2009-2-9

摘要

采用量子化学密度泛函理论(DFT) B3LYP/6-31G(d)方法对14 顶点双取代碳硼烷和金属硼烷几何构型进行优化, 结合有限场(FF)方法计算了各体系的极化率和二阶超极化率. 同时金属硼烷中金属原子采用赝势基组进行计算, 讨论基组对计算结果的影响. 结果表明, 14 顶点碳硼烷和金属硼烷中碳和金属元素的成键方式不同, 金属硼烷中各原子间距离比碳硼烷中大, 平面偏移角增大. 金属原子的引入有效增加分子的NLO系数, 同时金属硼烷的前线分子轨道能级差比碳硼烷小很多, 金属硼烷材料有可能表现出半导体甚至导体特性, 金属原子采用不同基组对计算结果影响不大.

关键词

[二阶超极化率](#) [碳硼烷](#) [金属硼烷](#) [DFT](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

仇永清 qiuyq466@nenu.edu.cn

作者个人主页:

樊敏 仇永清* 孙世玲 刘晓东 苏忠民

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (559KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[二阶超极化率” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [樊敏,仇永清,孙世玲,刘晓东,苏忠民](#)