

三枝加盖树状分子的一阶超极化率的理论研究

Theoretical Study on First Hyperpolarizabilities of End-Capped Triply Branched Dendrimers

摘要点击 323 全文点击 98 投稿时间: 2011-6-20 采用时间: 2011-7-13

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/04/444-450

中文关键词 [树状发光分子](#) [非线性光学](#) [超极化率](#)

英文关键词 [Dendritic chromophore](#) [Nonlinear optical](#) [Hyperpolarizability](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
王彦华	临沂大学理学院, 临沂276005	
刘凯*	临沂大学理学院, 临沂276005	liukai@lyu.edu.cn

中文摘要

利用密度泛函理论计算了一系列三枝加盖树状发光分子的性质. 发现加盖树状分子的二阶非线性光学性质和三支发色团的相对位置, 所加盖子的数量, 以及发色团的长度关系很大. 当树状分子三枝的偶极矩平行度较高时, 可以得到增强的一阶超极化率.

英文摘要

A series of end-capped triply branched dendritic chromophores have been studied by means of density functional theory calculations. It is found that the second order nonlinear optical properties of the end-capped dendrimers are strongly dependent on the mutual orientations of the three chromophores, numbers of caps and the conjugation length of the chromophores. Large enhancement of the first hyperpolarizability can be obtained when dipole moments of three branches in the dendrimers are highly parallelized.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计