

有机酸盐离子晶体的倍频性能与二次极化强度方均值关系

李宋贤 林立峰 林帆 刘世雄 陈建中

(福州大学化学系, 福州, 350002)

Relationship between Frequency Doubling Property and Mean Square of Second Order Polarizability in Organic Ionic Crystals

Li Songxian Lin Lifeng Lin Fan Liu Shixiong Chen Jianzhong

(Department of Chemistry, Fuzhou University, Fuzhou, 350002)

作者提出了二次极化率矢量模型, 认为它的方向与化学键的前线分子轨道间电子跃迁的荷移方向相反; 倍频基团的二次极化率矢量 $\beta(2\omega)$ 是该基团中化学键的二次极化率矢量的加和, 由此导出了衡量倍频基团在晶体中分布方式优劣程度的空间因子 G 和综合反映晶体倍频性能的单位二次极化强度方均值 $\bar{P}^2(2\omega)$ 。

基于验证上述模型, 合成了一系列2, 4-二硝基苯丙氨酸(HAP)的有机酸盐离子晶体, 通过测定它们的二次谐波相对强度 $I_{2\omega}/I_{\omega, KDP}$, 发现它们与通过结构参数计算的 $\bar{P}^2(2\omega)$ 值的大小规律是一致的。

由于上述化合物共有的大 π 键共轭体系2, 4-(NO₂)₂C₆H₃NH(AP分子碎片)的电子结构和分子结构基本是相同的, 故可认为晶体的倍频效应主要来源于该系列化合物共有的AP分子碎片的贡献, 从而说明有机酸成盐也是使晶体结构优化的一条可行的途径。