

Dans cette investigation, les contributions électroniques et vibrationnelles, à la polarisabilité linéaire ( $\alpha$ ) et la polarisabilité nonlinéaire de premier ordre ( $\beta$ ) sont évaluées pour un ensemble de molécules organiques push-pull. Les calculs ont été faits en HF/6-31G.

Il a été montré que, la pair D/A influe sur la structure géométrique, la distribution de la densité de charge et donc sur les propriétés électriques :  $\mu, \alpha$  et  $\beta$ . Aussi, pour un segment intercyclique donné, mise à part CH=CH, les composantes longitudinales  $\beta_L^v$  et  $\beta_L^e$  varient dans le même sens, en fonction de la nature du groupement accepteur ( COH, NO<sub>2</sub> et CF<sub>3</sub>). Dans tous les cas, la paire HO/NO<sub>2</sub> affiche les plus grandes valeurs de ces entités.

En considérant l'angle de torsion  $\phi$  entre les plans des deux cycles aromatiques, dans le cas de la paire HO/NO<sub>2</sub>,  $\beta_L^e(0)$  augmente lorsque cette angle diminue. Alors que nous n'avons pas trouvé de corrélation directe entre  $\beta_L^v(0)$  et  $\phi$ .

Les modes de vibration ayant des fréquences supérieures ou égales à 3000 cm<sup>-1</sup> ne contribuent pas à  $\beta_L^v(0)$ . Ainsi, plus de 50% de cette quantité est due à l'apport de trois, deux ou même des fois à un seul mode normal de vibration.