

## 非线性光学

### 取代位置对香豆素衍生物二阶非线性光学性质影响的DFT研究

梁小蕊<sup>1</sup>, 王刚<sup>2</sup>, 江炎兰<sup>1</sup>, 赵波<sup>3</sup>

1 海军航空工程学院, 山东 烟台 264001;  
2 中国科学院烟台海岸带研究所, 山东 烟台 264003;  
3 南京师范大学化学与环境科学学院, 江苏 南京 210097

摘要:

采用密度泛函理论 (DFT) B3LYP/6-31G方法, 对设计的6个不同位置取代氨基的香豆素衍生物的几何构型进行优化。在所得优化结构的基础上对这些分子的稳态二阶NLO系数 $\beta$ 值进行计算分析, 并采用含时密度泛函理论 (TD-DFT) 方法计算了其电子性质, 研究了取代位置对香豆素类衍生物分子的二阶NLO性质的影响规律。结果表明: 当氨基取代在4号位时香豆素分子中的羰基表现出供电性, 对分子内电荷转移非常不利, 不利于提高分子的 $\beta$ 值; 当氨基取代在3、5、6、7、8位时分子中的羰基表现出吸电性, 使分子形成D- $\pi$ -A构型, 并且氨基在3、7位的取代能够扩大体系的共轭范围, 有效增加了香豆素分子的 $\beta_{tot}$ 值。

关键词: 非线性光学 二阶非线性效应 密度泛函 香豆素 取代位置

### Investigation on effects of substitution position of coumarin on the second-order nonlinear optical properties by DFT method

LIANG Xiao-rui<sup>1</sup>, WANG Gang<sup>2</sup>, JIANG Yan-lan<sup>1</sup>, ZHAO Bo<sup>3</sup>

1 Naval Aeronautical and Astronautical University, Yantai 264001, China;  
2 Yantai Institute of Coastal Zone Research, Chinese Academy of Sciences, Yantai 264003, China;  
3 College of Chemistry and Environmental Science, Nanjing Normal University, Nanjing 210097, China

Abstract:

The Density Functional Theory (DFT) B3LYP method based on the 6-31G level was employed to optimize the geometric structures of six amino coumarin derivatives. On the basis of obtaining stable molecular configuration, combined with time-dependent density functional theory (TD-DFT), the static second-order Nonlinear Optic polarizabilities ( $\beta$ ) and the molecular electric spectrum was calculated by the same method. The results indicated that when amino substitute at the fourth position of coumarin the carbonyl show electron donating property which is a disadvantage for intramolecular charge transfer; when amino substitute at the third, fifth, sixth, seventh and eighth position of coumarin the carbonyl show electron withdrawing property which make the molecule form D- $\pi$ -A configuration. And the third and seventh position can expand the conjugate system of molecule which can increase the  $\beta_{tot}$  value of coumarin effectively.

Keywords: nonlinear optics second-order nonlinear effect density functional theory coumarin substitution position

收稿日期 2011-06-10 修回日期 2011-12-31 网络版发布日期 2012-07-01

DOI:

基金项目:

通讯作者: 梁小蕊 (1979-), 女, 山东烟台人, 讲师, 硕士, 主要从事非线性光学材料的研究。

作者简介:

作者Email: xiaoruiliang12@yahoo.com.cn

### 参考文献:

- [1] Brédas J L. Molecule Geometry and Nonlinear Optics[J]. Science, 1994, 263(2): 487-488.
- [2] Zhao Bo, WuYun, Zhou Zhihua, et al. The important roles of the bromo group in improving the properties of organic nonlinear optical materials[J]. J Mater Chem, 2000, 10(1): 1513-1517.
- [3] Jacquemin D, Quinet O, Champagne B, et al. NLO response of polymethineimine and polymethineimine/ polyacetylene conformers: Assessment of electron correlation effects, J. Chem. Phys 2004, 120: 9401

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF (828KB)
- [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

- 非线性光学
- 二阶非线性效应
- 密度泛函
- 香豆素
- 取代位置

本文作者相关文章

- 梁小蕊
- 王刚
- 江炎兰
- 赵波

PubMed

- Article by Liang, X.J
- Article by Yu, g
- Article by Jiang, T.L
- Article by Diao, b

- [4] Deng Yan, Wang Pei, Zhang Douguo, et al. Nonlinear optical properties of metal particle composite films [J]. Chinese Journal of Quantum Electronics (量子电子学报), 2006, 23(5) : 687-691 (in Chinese)
- [5] Liang Xiaorui, Jiang Yanlan, Wang Gang, et al. Research on the Second-Order Nonlinear Optical properties of Some Schiff Base Derivatives[J]. Journal of Naval Aeronautical and Astronautical University (海军航空工程学院学报), 2008, 23(4) : 465-469 (in Chinese)
- [6] Jacquemin D, Quinet O, Champagne B, et al. NLO response of polymethineimine and polymethineimine/ polyacetylene conformers: Assessment of electron correlation effects, J. Chem. Phys 2004, 120: 9401
- [7] Liang Xiaorui, Zhao Bo, Zhou Zhihua. Ab initio study on the second-order nonlinear optical properties of some coumarin derivative [J]. Acta Physica Sinica (物理学报), 2006, 55(2) : 723-728(in Chinese)
- [8] Li Enling, Zhu Hong, Li Lisha, et al. Structures and Photoelectron Energy Spectroscopy about GaN<sub>3</sub> (n=1~8) Clusters[J]. Acta Photonica Sinica (光子学报), 2010, 39, (3) : 470-476 (in Chinese)
- [9] Li Enling, Ma Deming, Liu Mancang, et al. Research on Structure and Vibrational Frequency of GaN Neutral and Ion Clusters [J]. Acta Optica Sinica (光学学报), 2009, 29(12) : 3248-3254 (in Chinese)
- [10] Zhong Shouxian, Li Guangshan, Du Gonghe, et al. DFT Study on the Molecular Spectra and Excited State of Pentathienoacen [J]. Chinese Journal of Luminescence (发光学报), 2008,29(5) : 821-826 (in Chinese)
- [11] Tretiak S, Chemyak V, Mukamel S. Origin, scaling and maturation of second order polarizabilities in donor/acceptor polyenes. Chemical Physics Letters. 1998, 287: 75

本刊中的类似文章

1. 马会芳 杨性愉. 负折射介质中高阶非线性效应所致啁啾的研究[J]. 量子电子学报, 2009,26(3): 346-351
2. 李华刚. 三维自散焦介质中交叉传输的光束诱导聚焦[J]. 量子电子学报, 2009,26(3): 352-355
3. 张少武 易林. 广义非局域非线性薛定谔模型的自相似解[J]. 量子电子学报, 2009,26(4): 465-472
4. 刘安玲 张为俊 高晓明. 着色丙酮中受激热散射和纯丙酮中受激布里渊散射的频率响应[J]. 量子电子学报, 0,(): 475-478
5. 刘安玲 张为俊 高晓明. 着色丙酮中受激热散射和纯丙酮中受激布里渊散射的频率响应[J]. 量子电子学报, 2009,26(4): 473-476
6. 金铨 陈宪锋 黄正逸 沈小明 蒋美萍. 非线性微腔的光学双稳态[J]. 量子电子学报, 2009,26(5): 591-595
7. 李爱萍 刘成周 王安全. 高阶效应对微结构光纤中超连续谱产生的影响[J]. 量子电子学报, 2009,26(5): 596-601
8. 高健 张霞 周会丽 任晓敏 黄永清. 色散平坦光子晶体光纤色散和非线性特性研究[J]. 量子电子学报, 2009,26(5): 602-606
9. 吕华 张巧芬. 补偿光纤的参数对自相似脉冲压缩效应的影响[J]. 量子电子学报, 2009,26(5): 607-612
10. 江光裕 伏燕军 黄彦 万生鹏. 梳状色散光纤中自相似脉冲传输的数值研究[J]. 量子电子学报, 2009,26(5): 613-618
11. 姜其畅 苏艳丽 吉选芒 谢世杰. 高阶空间电荷场对匹配高斯光束自偏转特性的影响[J]. 量子电子学报, 2009,26(5): 619-623
12. 孙坚 潘涛 徐国定. 二维网格空间耦合激光阵列的时空混沌同步[J]. 量子电子学报, 2009,26(6): 708-714
13. 吉选芒 姜其畅 刘劲松. 外加电场双光子光伏光折变晶体中的空间孤子[J]. 量子电子学报, 2009,26(6): 722-727
14. 陈海涛 王飞 吴正茂. 掺铒光纤放大器中孤子脉冲获得线性啁啾的研究[J]. 量子电子学报, 2009,26(6): 728-735
15. 吴猛 赵国忠 武利忠. 鞣花酸的太赫兹光谱研究[J]. 量子电子学报, 2010,27(1): 1-5