

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

## 论文

### $\beta$ -二酮环金属铂配合物的电子光谱和非线性光学性质的理论研究

陈俊蓉, 李权, 赵可清

四川师范大学化学与材料科学学院, 先进功能材料四川省高校重点实验室, 成都 610066

摘要:

采用密度泛函理论, 对磷光材料 $\beta$ -二酮环金属铂配合物的电子吸收光谱和二阶与三阶非线性光学性质进行理论计算研究. 计算结果表明, 基态到第一激发态的跃迁全部来源于配体到配体和金属到配体的混合跃迁. 此类配合物具有较好的非线性光学性质, 产生二阶非线性光学性质的主要原因是左边配体间的 $n-\pi^*$ 跃迁, 产生三阶非线性光学性质的主要原因则是金属Pt原子到2,4-戊二酮上的 $d-\pi^*$ 电荷跃迁, 同时左边配体间的 $n-\pi^*$ 的跃迁也有重要影响.

关键词:  $\beta$ -二酮环金属铂配合物; 电子光谱; 非线性光学性质; 密度泛函理论

### Theoretical Studies on Electronic Spectra and Nonlinear Optical Properties of Cyclometalated Platinum Complexes with $\beta$ -Diketonate Ancillary Ligands

CHEN Jun-Rong, LI Quan\*, ZHAO Ke-Qing

College of Chemistry and Material Science, Sichuan Normal University, Key Laboratory of Advanced Functional Materials, Sichuan Province Higher Education System Sichuan, Chengdu 610066, China

Abstract:

DFT study on the electronic absorption spectra, second-order and third-order nonlinear optical properties of important phosphorescent materials: cyclometalated platinum complexes with  $\beta$ -Diketonate ancillary ligands are performed on Gaussian 03 package. Analysis on the frontier orbital of ground states shows that the electronic transition from the ground state to the first excited state are LLCT and MLCT transition. These complexes display good nonlinear optical properties. The predominant for second-order nonlinear optical properties is the charge transfer with  $n-\pi^*$  character occurring between the left ligands. The third-order nonlinear optical properties is main determined by the charge transfer with  $d-\pi^*$  character from metal Pt atom to  $\beta$ -Diketonate ancillary ligands, in addition, the transition between the left ligands is also played an important role.

Keywords: Cyclometalated platinum complexes with  $\beta$ -Diketonate ancillary ligand; Electronic spectrum; Nonlinear optical property; Density functional theory

收稿日期 2009-07-28 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 50811140156), 四川省教育厅自然科学基金(批准号: 07ZA093)和四川师范大学科研创新团队研究基金(批准号: 025156)资助项目.

通讯作者: 李权, 男, 博士, 教授, 主要从事研究方向. E-mail: liquan6688@163.com

作者简介:

## 参考文献:

- [1] Liu C. G., Qiu Y. Q., Sun S. L., et al.. Chem. Phys. Lett. [J], 2007, 443: 163—168
- [2] Liu C. G., Qiu Y. Q., Sun S. L., et al.. Chem. Phys. Lett. [J], 2006, 429: 570—574
- [3] Guthmuller J., Simon D.. J. Phys. Chem. A [J], 2006, 110: 9967—9973
- [4] Karton A., Iron M. A., Boom M. E., et al.. J. Phys. Chem. A [J], 2005, 109: 5454—5462
- [5] Silva I. C., Silva R. M., Silva K. M. N.. J. Mol. Struct. [J], 2005, 728: 141—145
- [6] Liyanage P. S., Silva R. M., Silva K. M. N.. J. Mol. Struct. [J], 2003, 639: 195—201
- [7] LIU Cai-Ping(刘彩萍), LIU Ping(刘萍), WU Ke-Chen(吴克琛). Acta Chem. Sin. (化学学报) [J], 2008, 6:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (514KB)

[HTML全文]

[\({article.html\\_WenJianDaXiao}\)](#)  
KB)

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

$\beta$ -二酮环金属铂配合物; 电子光谱;  
非线性光学性质; 密度泛函理论

本文作者相关文章

PubMed

- [8]LI Guang-Xue(李广学), PENG Xin-Hua(彭新华), LV Chun-Xu(吕春绪). J. Organic Chem.(有机化学)[J], 2006, 26: 839—844
- [9]DING Fu-Jiang(丁涪江), HE Yun-Qing(何云清), LIU Liu-Xie(刘柳斜), et al.. Acta. Chem. Sin.(化学学报)[J], 2005, 63: 2199—2204
- [10]DING Fu-Jiang(丁涪江), ZHAO Ke-Qing(赵可清). Acta. Chem. Sin.(化学学报)[J], 2006, 64: 2003—2007
- [11]Long N. J.. Angew. Chem. Int. Ed. Engl.[J], 1995, 34: 21—38
- [12]CHEN Xin(陈新), LI ying(李瑛), JING Qing(蒋青). Acta. Phys.-Chim. Sin.(物理化学学报)[J], 2008, 24: 1797—1802
- [13]Brooks J., Babayan Y. S., Lamansky S., et al.. Inorganic. Chem.[J], 2002, 41: 3055—3066
- [14]Connick W. B., Miskowski V. M., Houlding V. H., et al.. Inorg. Chem.[J], 2000, 39: 2585—2592
- [15]Connick W. B., Marsh R. E., Schaefer W. P., et al.. Inorg. Chem.[J], 1997, 36: 913—922
- [16]Connick W. B., Henling L. M., Marsh R. E., et al.. Inorg. Chem.[J], 1996, 35: 6261—6265
- [17]Li J., Feng J. K., Sun J. C.. J. Phys. Chem.[J], 1994, 15: 587—601
- [18]QIU Yong-Qing(仇永清), YU Hai-Ying(于海英), SU Zhong-Min(苏忠民), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2004, 25(12): 2335—2338
- [19]Kurtz H. A., Stewart J. J. P., Dieter K.. J. Comp. Chem.[J], 1990, 11: 82—87
- [20]Karna S. P., Dupuis M.. J. Comput. Chem.[J], 1991, 12(4): 487—504
- [21]Jensen L., Duijnen P. T., Snijders J. G.. et al. Chem. Phys Lett.[J], 2002, 359: 524—529
- [22]FENG Ji-Kang(封继康). Acta Chem. Sin.(化学学报)[J], 2005, 63: 1245—1256
- [23]LIU Xiao-Dong(刘晓东), FENG Ji-Kang(封继康), REN Ai-Min(任爱民), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2008, 29(3): 600—604

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text" value="8517"/>