

香草醛晶体光学非线性系数的有限场方法研究

林晨升, 吴克琛

中国科学院福建物质结构研究所.福州(350002);中国科学院结构化学国家重点 实验室.福州(350002)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 采用有限场方法计算了有机非线性材料3-甲氧基-4-羟基-苯甲醛(分子式C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>, 简称MHBA)的二阶非线性光学系数d<sub>21</sub>, d<sub>22</sub>, d<sub>23</sub>, d<sub>25</sub>。研究表明在MP2近似和6-31G+(p,d)基组水平上理论值能较好地与实验值符合,

同时也表明拉电子基团HC=O和推电子基团HO对MHBA分子的光学非线性性能的影响很大,而晶体中分子间的氢键作用对d值的贡献很小。

**关键词** [香草醛](#) [非线性材料](#) [光学系数](#) [苯甲醛P](#) [有限元法](#)

分类号 [0644](#)

## Studies on the nonlinear optical crystal of vanillin using finite field method

Lin Chensheng, Wu Kechen

Fujian Inst Res Struct Matter, Acad Sinica.Fuzhou(350002);.Fuzhou (350002)

**Abstract** the second-order optical nonlinearity of crystal 3-methoxy-4-hydroxy- benzaldehyde (MHBA) was studied by using the finite field method at the MP2 level with basis set of 6-31G+(p,d). The theoretical results of d<sub>21</sub>, d<sub>22</sub>, d<sub>23</sub> and d<sub>25</sub> were in agreement with the experimental data. The electron-accepting group HC=O and the electron-donating group HO played important roles in the nonlinear optical property of MHBA. The results also showed that the hydrogen bonds did not contribute significantly to the crystal nonlinear optical coefficients.

**Key words** [VANILLIN](#) [NON-LINEAR MATERIALS](#) [BENZALDEHYDE P](#) [FINITE ELEMENT METHODS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“香草醛”的  
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [林晨升](#)

· [吴克琛](#)