

近红外波段激光调 Q 染料的结构与光谱

马春荣 李迺吉 李家泽 丁陟高

(北京工业学院)

Structure and spectra of Q-switched laser dyes in the near infrared range

Ma Chunrong, Li Naiji, Li Jiaze, Ding Zhigao

(Beijing Institute of Technology)

我们于 1980 年研制成功了 BDN [双(4-二甲基氨基二硫代苯乙烯)镍] 及 BDN-PMMA (简称)染料片。它最突出的优点是光化稳定性及热稳定性好,因而工作寿命长。染料盒在 31.2 兆瓦/厘米² 功率密度下,可工作 20 万次以上;染料片在 12 次/分、输入能量 8 焦耳、输出 23 毫焦耳时已工作了 3 万次以上。

1981 年,我们又研制出两种近红外波段的调 Q 染料。它们与 BDN 都是由 NiS₄C₄H₄ 为核心而衍生出来的物质,总称为镍硫络合物。

随着激光波长向近红外波段的扩展,需要有各相应的调 Q 染料,以 NiS₄C₄H₄ 为核可衍生出十几种材料,每种材料的最大吸收峰位置随取代基结构而异。

按半径典法计算镍硫络合物的分子轨道及与试验数据对比分析,认为这类物质的基态构型为 $(2b_{1u})^2(2b_{2g})^2(3a_g)^2(2b_{3g})^2(4a_g)^2(3b_{2g})^0(3b_{1g})^0$ 。靠近红外区的强吸收是一个电子跃迁引起的,能级变化为 $(2b_{1u}) \rightarrow (3b_{2g})$ 。随取代基结构不同,对此二能级差的微扰不同,因而最大吸收峰的位置有所差异。

若在 NiC₄H₄S₄ 环系母体代上吸电子基团,查觉不出电子跃迁。若代上供电子取代基,出现向长波方向移动的最大吸收峰。在一定范围内供电子能力愈强的取代基,镍硫络合物的最大吸收峰的位置向长波方向移动愈多。

这类物质的结构是四方平面,与平面垂直的是大 σ 键,离域能大。它的基态构型为 $1A_g$ 态,每个成键轨道上皆充满了电子,自旋为零,是能量最低的状态,因而光化稳定性及热稳定性好,工作寿命长。