

新疆理化所在汞基红外非线性光学材料方面获进展

红外非线性光学晶体作为激光频率转换的关键器件，在全固态激光器中应用广泛。当前，商用的中远红外非线性光学晶体主要包括类金刚石结构的 AgGaS_2 、 AgGaSe_2 和 ZnGeP_2 等化合物。然而，由于各自本征的性能缺陷，这些材料已不能完全满足当前红外激光技术发展的需求。因此，亟需开发性能优异的新型中

远红外非线性光学材料。汞具有独特的电子构型，利于形成高度极化的 Hg^{2+}

离子，从而产生显著的非线性光学响应。因此，含汞硫属化合物被视为开发高性能红外非线性光学材料的最有前景的系统之一，但由于 Hg 的5d和6s电子，之前发现的汞基硫属化合物普遍存在带隙小的缺点。

中国科学院新疆理

化技术研究所晶体材料研究中心在前期研

究的基础上，通过系统分析 $[\text{HgS}_4]$ 基团畸变对微观性能的影响，结合结构预测，在 Hg-Zn-P-S 体系合成出首例宽带隙的汞基红外非线性光学材料 $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ 。该化合物带隙达到3.37

eV，打破了汞基红外非线性光学材料带隙长期小于3.0

eV的带隙“壁垒”。同时， $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ 表现出大的倍频效应，约为1.1

$\times \text{AgGaS}_2$

，并能实现型相位匹配。相比于前期

开发的大倍频红外非线性光学材料 $\text{Hg}_3\text{P}_2\text{S}_8$ ， $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$

表现出更平

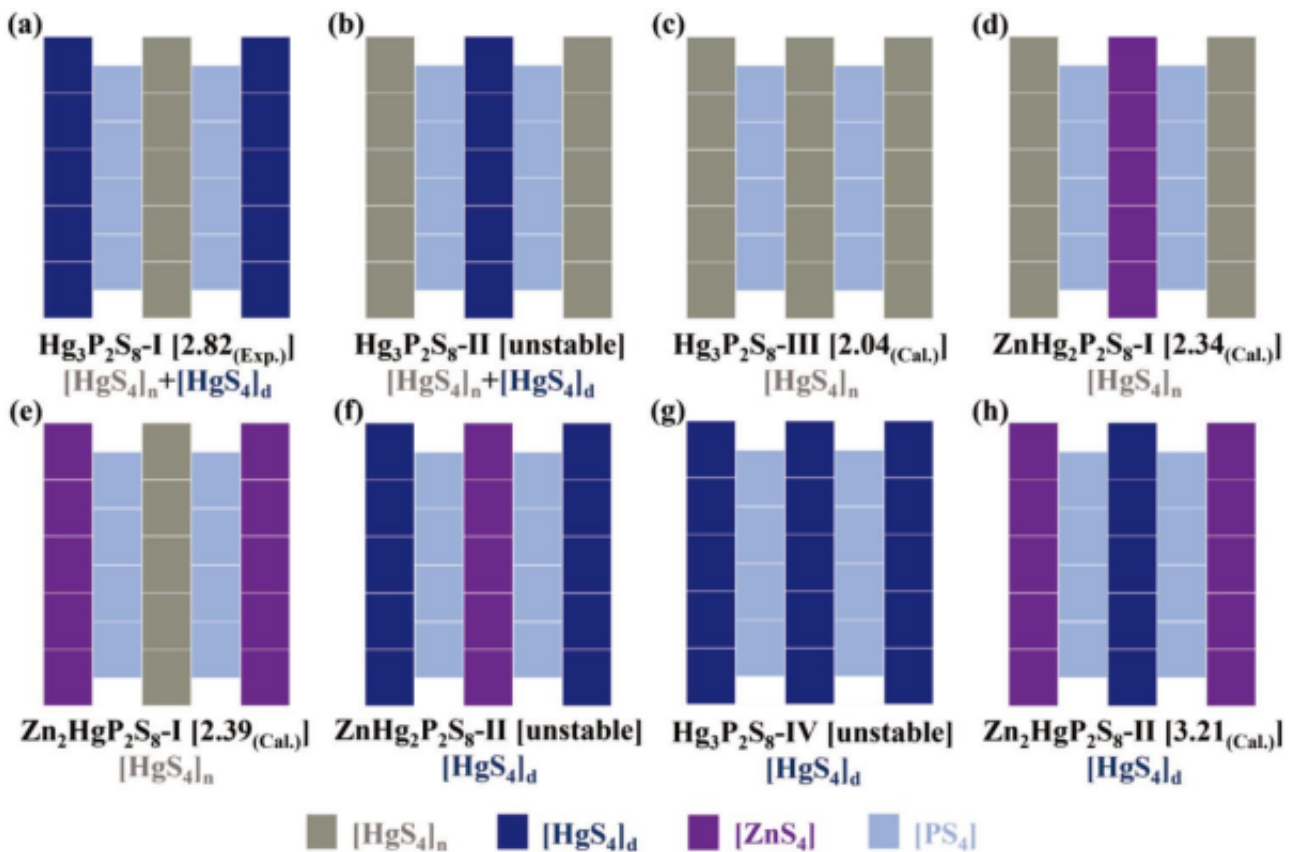
衡的倍频效应及光学带

隙。理论计算结果表明，在类金刚石结构中，

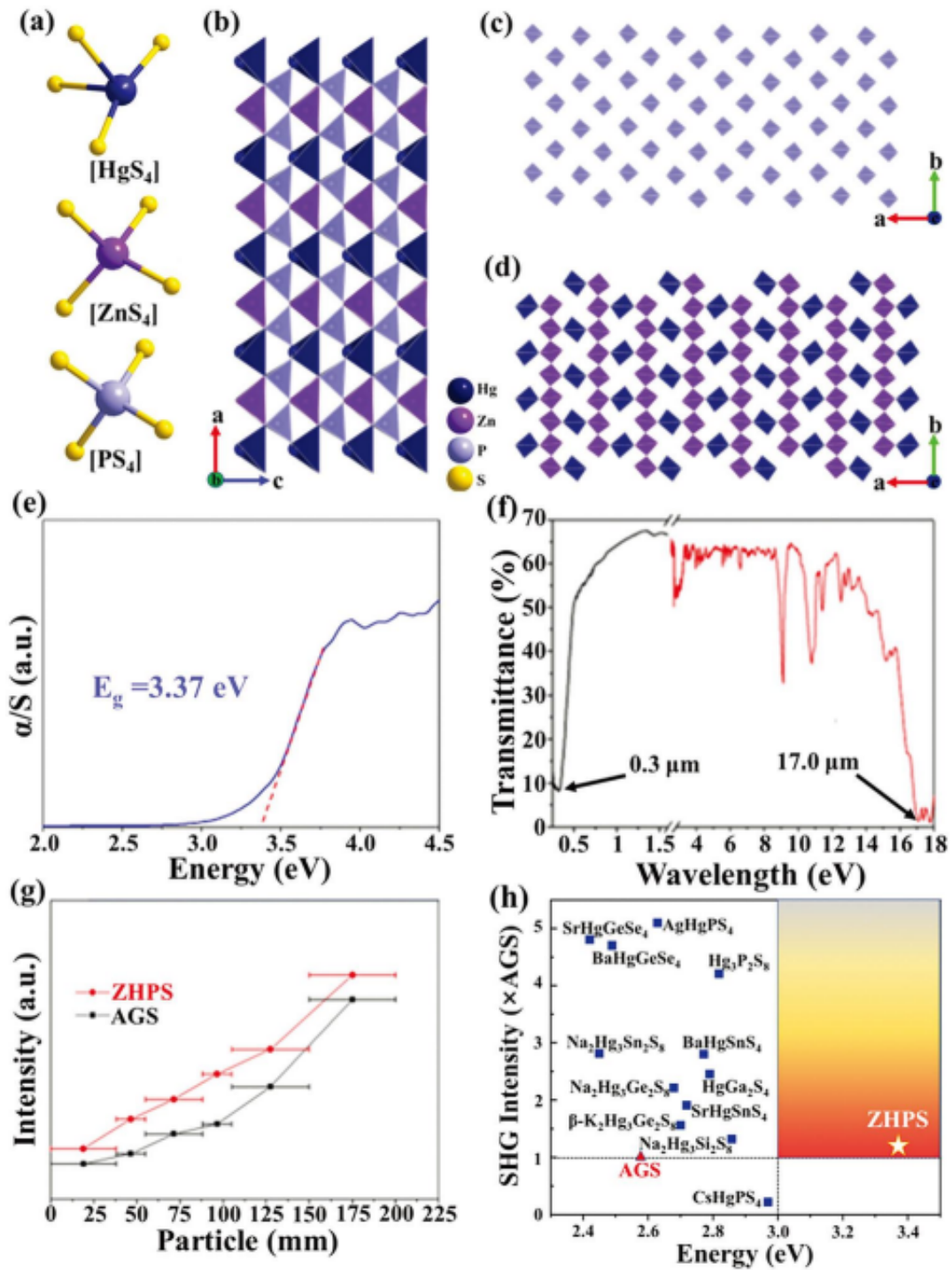
相比于低畸变度的 $[\text{HgS}_4]$ 基团，高度畸变的 $[\text{HgS}_4]$

基团更利于诱导宽的带隙，这为后续设计宽带隙汞基类金刚石结构材料提供了新思路。

上述成果将激励科研人员探索更多综合性能优异的汞基类金刚石红外非线性光学材料。相关研究成果发表在Small (DOI: 10.1002/smll.202305074) 上。



通过组合 $[\text{HgS}_4]_n$ 、 $[\text{HgS}_4]_d$ 、 $[\text{ZnS}_4]$ 、 $[\text{PS}_4]$ 四面体基团，设计的类金刚石晶体结构。(a) $\text{Hg}_3\text{P}_2\text{S}_8$ -I，(b) $\text{Hg}_3\text{P}_2\text{S}_8$ -II，(c) $\text{Hg}_3\text{P}_2\text{S}_8$ -III，(d) $\text{ZnHg}_2\text{P}_2\text{S}_8$ -I，(e) $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ -I，(f) $\text{ZnHg}_2\text{P}_2\text{S}_8$ -II，(g) $\text{Hg}_3\text{P}_2\text{S}_8$ -IV，(h) $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ -II (ZHPS)。



(a) $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ 的原子配位情况；(b-d) $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ 的晶体结构；(e) $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ 的实验带隙；(f) $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ 的透过光谱；(g) $\text{Zn}_2\text{HgP}_2\text{S}_8$ 和 AgGaS_2 在 $2.09 \mu\text{m}$ 激光下不同颗粒度的倍频效应；(h) 汞基化合物的性能统计分析。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/202052.html>