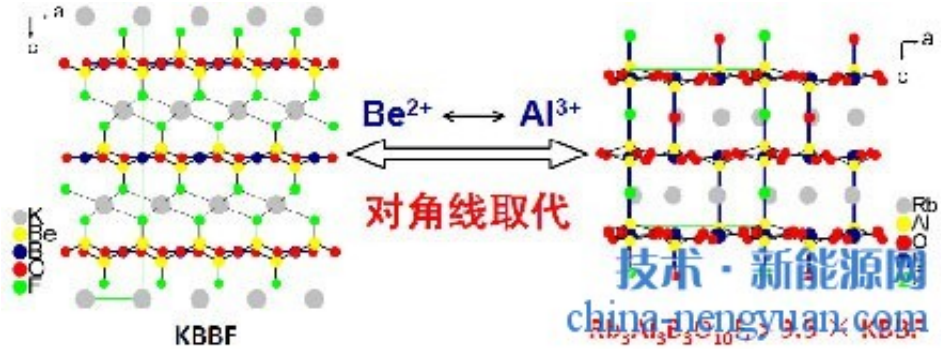
福建物构所发现新型无铍深紫外非线性光学晶体材料



深紫外激光由于波长短、能进行更高精度加工的优点，在半导体光刻、激光光电子能谱仪和激光切割上具有重要的应用。目前，$KBe_2BO_3F_2$（KBBF）是唯一能实际输出深紫外激光的非线性光学（NLO）晶体，但是，KBBF含剧毒铍元素且其晶体层状生长习性严重，因此，急需探索新型深紫外NLO晶体材料。

中国科学院福建物质结构研究所中科院光电材料化学与物理重点实验室罗军华课题组在国家自然科学优秀青年基金和副研究员赵三根主持的海西研究院“春苗”人才专项等项目资助下，基于元素周期表的对角线规则，利用Al^{3+}取代有毒的Be^{2+}，设计合成了一种新型无铍深紫外NLO材料$Rb_3Al_3B_3O_{10}F$（RABF）。

RABF继承了KBBF晶体的结构优点，其结构中$[Al_3(BO_3)OF]_\infty$平面层继承了KBBF晶体中$[BO_3]^{3-}$非线性基元的高度取向一致排列方式，从而基本保留了KBBF良好的光学性能。实验结果显示，RABF的透过范围达到了深紫外区；在1064nm波长激光照射下，其粉末倍频效应（1.2 × KDP）与KBBF相当，并且可以实现相位匹配。

同时，RABF中$[Al_3(BO_3)OF]_\infty$平面层之间通过键合力强的Al-F和Al-O键紧密连接，计算表明其层间作用力比KBBF的（K-F离子键）提高了约一个数量级（≥ 9.5 × KBBF），从而使得RABF晶体极大地克服了KBBF的层状生长习性。

该课题组与中科院理化技术研究所研究员林哲帅合作，对其光学性质作了第一性原理理论计算，其结果与实验数据相吻合。相关研究成果发表在《美国化学会志》（J. Am. Chem. Soc., 2015, 137, 2207-2210)上，并申请了中国发明专利。该研究结果将促进无铍深紫外非线性光学晶体材料的发展。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/82174.html