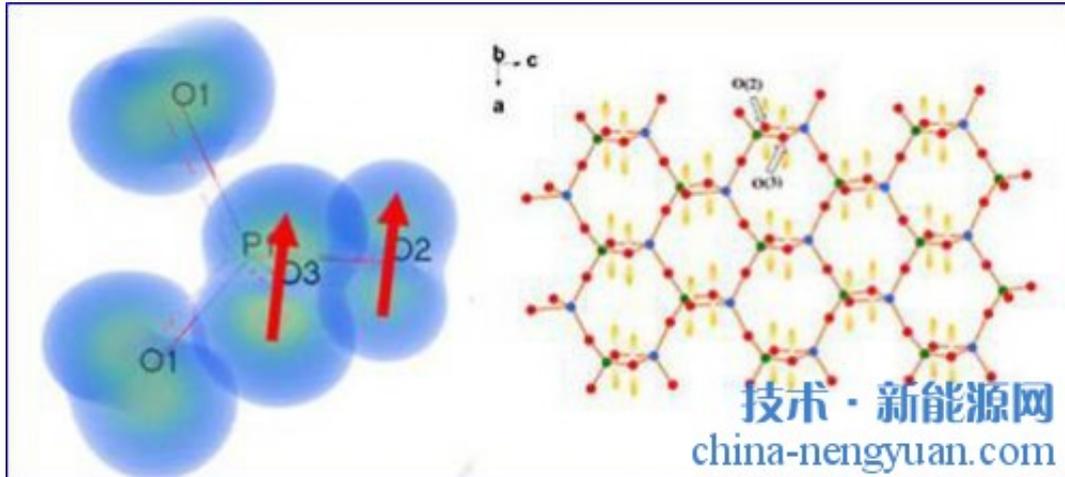


## 新疆理化所磷酸盐深紫外非线性光学晶体材料研究获进展



非线性光学晶体是一种重要的光电信息功能材料，在信息、科研、能源、工业制造和医疗卫生等领域具有广泛的应用前景。随着激光精密机械加工工业、激光化学、紫外激光光谱学和激光医学等学科的飞速发展，人们迫切需要发展全固态深紫外相干光源，其关键突破点在于深紫外波段（光谱范围在200nm以下）的非线性光学晶体的研制和应用。近几年来，在新发展起来的深紫外非线性光学晶体材料中，磷酸盐材料因其短紫外截止边的优势，成为近期的一个研究热点。然而，磷酸盐中 $PO_4$

功能基团的微观二阶倍频系数仅为平面B-O氧基团（ $B_3O_6$ 和 $BO_3$ ）的十分之一，导致磷酸盐材料具有倍频系数较小的缺陷。因此，需要在保证磷酸盐宽的透光范围的同时，通过合理设计功能基团的组合和排列方式，有效增强其倍频效应。

中国科学院新疆理化技术研究所新型光电功能材料实验室潘世烈研究团队近年来致力于新型非线性光学晶体的研究。借鉴前期复合碱金属硼酸盐非线性光学晶体材料的研究成果，通过在磷酸盐中引入离子半径差异较大的碱金属阳离子，该研究团队成功设计合成了一种磷酸

盐深紫外非线性光学晶体材料 $LiCs_2PO_4$ 。该化合物不仅展现出短的紫外截止边（174nm），而且具有大倍频效应（2.6倍KDP），这是迄今为止磷酸盐深紫外非线性光学晶体材料体系中倍频效应最大的化合物。

同时， $LiCs_2PO_4$ 能够实现1064nm下相位匹配，晶体易于生长，可望作为新型深紫外非线性光学晶体材料。

此外，该材料是正磷酸盐，其大倍频效应的来源机制不同于其他研究组提出的聚磷酸根基团倍频增益效应。科研人员通过第一性原理对该

材料的光学性质作了理论计算，结果发现该材

料的晶体结构中具有 $LiO_4-PO_4$

基团的共边连接，而这种特殊的连接方式有利于O-2p非键轨道的定向排列，导致磷氧结构基元微观非线性光学系数的有效叠加，从而使 $LiCs_2PO_4$ 显示出较大的倍频效应。这一工作为在磷酸盐中设计具有较大倍频效应的非线性光学晶体材料提供了新的研究思路。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（J. Am. Chem. Soc.）上。潘世烈研究团队硕士研究生李琳和助理研究员王颖为论文共同第一作者。

该研究工作得到国家自然科学基金和中科院“西部之光”等项目的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/96732.html>