理化所等在深紫外非线性光学晶体的研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/14090.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

目前，全固态深紫外激光器通过非线性光学晶体进行波长转换才可产生深紫外激光。利用深紫外非线性光学晶体对红外（如波长1064nm）激光进行多级倍频转换，可获得波长小于200nm、光子能量高、光束质量好的深紫外激光，该光源在光刻加工、医学、高精尖科研设备、光化学、激光光谱等重要领域具有重大应用需求。要实现深紫外激光输出，非线性光学晶体在拥有满足相位匹配能力的双折射率的同时，还须具备足够宽的带隙、足够大的倍频效应，但晶体的带隙和倍频效应之间存在着此消彼长的矛盾关系。如何使材料带隙、倍频效应、双折射率在同一个晶体结构中达到精巧平衡以实现深紫外激光输出成为难题。

中国科学院理化技术研究所研究员林哲帅课题组开展了“ 类金刚石结构改造工程 ”和“ 范德瓦尔斯结构设计策略 ”，在深紫外非线性光学晶体的探索上取得了进展。科研人员通过对类金刚石结构进行结构改造，构建缺陷型类金刚石结构、引入平面共轭基团和引入羟基等策略，获得了第一个羟基碳酸盐深紫外非线性光学晶体——$LiZn(OH)CO_3$。该材料同时具有宽的带隙（Eg＞6.5eV），强的倍频响应（≈3.2×KDP）和大的双折射（Δn=0.147@1064nm），满足了深紫外非线性光学晶体三个性能指标。第一性原理计算评估显示，$LiZn(OH)CO_3$的相位匹配能力达到深紫外波段，其理论最短相位匹配波长在在

相关研究成果以*$LiZn(OH)CO_3$:ADeep-Ultraviolet Nonlinear Optical Hydroxycarbonate Designed from Diamond-like Structure*为题，在线发表在*Angewandte Chemie International Edition*上。论文第一作者为博士研究生刘晓萌，论文通讯作者为博士公丕富博士和研究员林哲帅。该研究将深紫外非线性光学材料的探索进一步扩展到羟基碳酸盐体系，并指出类金刚石结构可以同时具备宽的带隙和大的倍频效应，为探索深紫外非线性光学材料提供了设计模板。

范德瓦尔斯材料通过层间的范德瓦尔斯力将二维平面连接，构成三维材料。由于其层间仅存在较弱的分子间作用力，层与层之间的结构可控性好，易于对材料性能进行调节，以实现深紫外非线

性光学性能的平衡。林哲帅研究组提出了深紫外材料范德瓦尔斯结构设计策略，将KBBF晶体的非范德瓦尔斯(BO_3)-(BeO_3F)层逐步设计改造成范德瓦尔斯(BO_3)-(BeO_4H)层和(BO_4)-(BeO_4)层，并由此筛选出深紫外非线性光学铍硼酸盐$Be_2BO_5H_3$（BBH）。在此基础上，理论设计出了另一种潜在的深紫外非线性光学材料BeB_2O_4（BEBO）。计算显示，这两种化合物均具备大的带隙、倍频效应以及适中的双折射率，实现了深紫外非线性光学的性能平衡，其最短相位匹配波长分别达到了172nm和152nm。这两种化合物在深紫外波段的理论倍频系数都较大，分别为0.52pm/V(BBH)和0.34pm/V(BEBO)。此外，得益于范德瓦尔斯特性，这两种深紫外材料易于改造成为二维层状材料，有望将深紫外非线性光学性质的研究拓展至二维材料。相关研究成果以*Deep-Ultraviolet Nonlinear Optical van der Waals Beryllium Borates*为题，在线发表在Angewandte Chemie International Edition上。论文第一作者为博士康雷，论文通讯作者为林哲帅和北京计算科学研究中心研究员黄兵。

上述研究工作得到国家自然科学基金、中科院青年促进会和中科院功能晶体与激光技术重点实验室的支持。

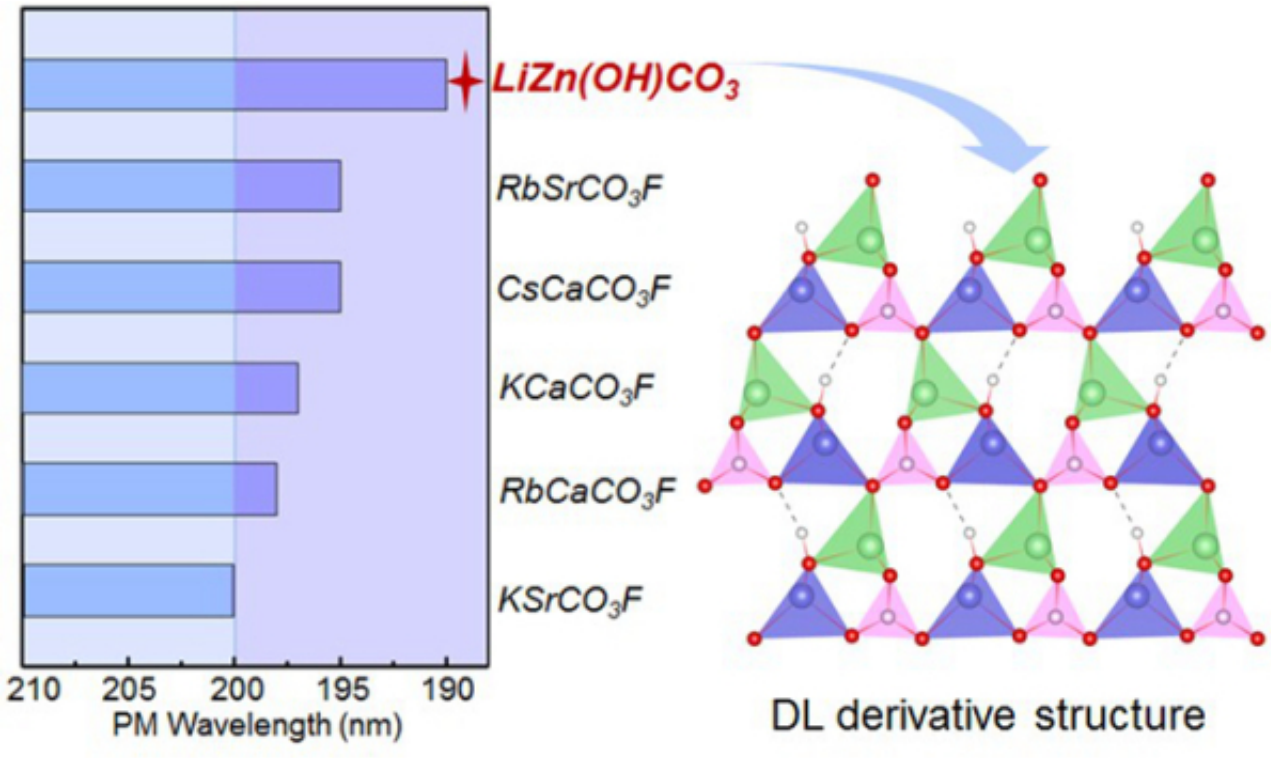


图1.$LiZn(OH)CO_3$的最短相位匹配波长以及它的类金刚石结构改造

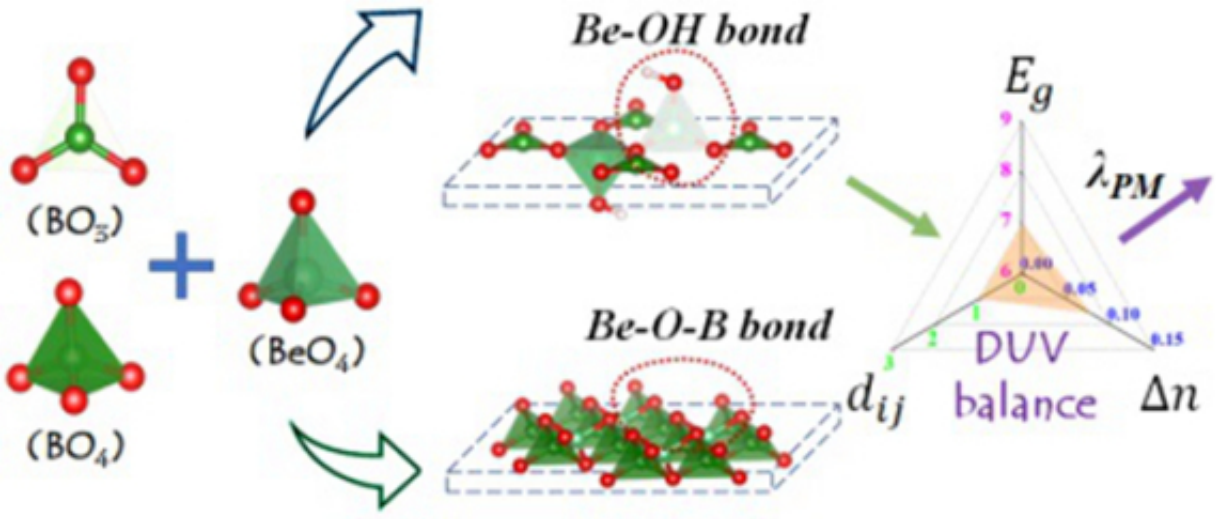


图2.深紫外非线性光学范德瓦尔斯铍硼酸盐的设计策略

研究团队单位：理化技术研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发