
新疆理化所氟化硼磷酸盐深紫外非线性光学晶体研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/20343.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！

新疆理化所氟化硼磷酸盐深紫外非线性光学晶体研究取得进展。波长短于200 nm的深紫外激光具有能量分辨率高、光谱分辨率高、光子通量密度大等特点，在激光光刻、激光微加工、先进科学仪器等方面颇具应用价值。作为全固态激光器输出深紫外激光的关键材料，深紫外非线性光学晶体新材料的制备探索一直是前沿课题。

中国科学院新疆理化技术研究所晶体材料研究中心致力于新型深紫外非线性光学晶体的设计、制备、生长及性能基础研究。前期工作提出了硼酸盐的“氟化策略”，提出氟化硼酸盐是探索深紫外非线性光学材料的新体系，发明了ABF族深紫外非线性光学晶体(Angew. Chem. Int. Ed., 2017, 56, 3916 – 3919; J. Am. Chem. Soc., 2017, 139, 10645 – 10648; Angew. Chem. Int. Ed., 2017, 56, 14119 – 14123; Angew. Chem. Int. Ed., 2018, 57, 2150 – 2154)。

近期，科研团队进将“氟化策略”拓展至硼磷酸盐体系，合成了一例具有复合阴离子基团的氟化硼磷酸盐深紫外非线性光学晶体(NH₄)₃B₁₁PO₁₉F₃(ABPF)。该晶体具有独特的[B₅PO₁₄F]基本构筑单元，其阴离子框架呈现出类似于目前唯一实用化深紫外非线性光学晶体——KBBF的[B₅PO₁₀F] ∞ 层，同时层间具有强的B-O-P共价键，层间距较小、层间作用力较强，因而避免了晶体的层状生长习性。ABPF晶体满足深紫外非线性光学晶体的三个基本条件，即短波长截止边达深紫外区(183 nm)、倍频效应大(1.2 $\times$ KDP)及匹配深紫外相位条件的适中双折射率(0.088 @ 1064 nm)，是潜在的深紫外非线性光学材料。该研究通过结构分析和第一性原理计算阐明了[BO₃]、[BO₄]、[BO₃F]及[PO₄]基元对晶体的线性及非线性光学性质的影响，提出 π 共轭[BO₃]基元利于获得较大的倍频效应和双折射率，使ABPF能够突破“200 nm壁垒”。具有大HOMO-LUMO能隙的非 π 共轭[BO₄]、[BO₃F]及[PO₄]基元利于消除[BO₃]基元的悬挂键，从而获得较短的截止边。因此，ABPF优异的综合性能源于由 π 共轭和非 π 共轭基元组成的独特类KBBF结构。该研究证明了“氟化策略”和多阴离子基团设计策略在探索高性能深紫外非线性光学晶体方面的有效性。

相关研究成果发表在《国家科学评论》(National Science Review)上。研究工作得到科技部、国家自然科学基金委员会和中科院等的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：新疆理化技术研究所

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](https://www.iikx.com)转发