

福建物构所非线性光学原子响应理论研究取得进展

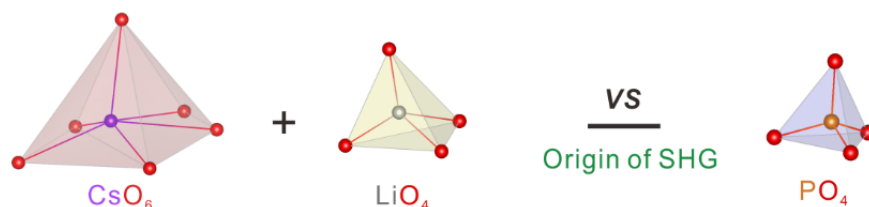
作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/2702.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！

福建物构所非线性光学原子响应理论研究取得进展。非线性光学材料是重要的无机光电信息功能材料之一，是激光技术和现代军事技术中不可或缺的关键材料。中国科学院福建物质结构研究所非线性光学晶体的学术研究和产业化方面，一直处于世界领先水平。早在上世纪80年代，福建物构所发现了BBO和LBO两个重要的非线性光学晶体，广泛运用于可见光和紫外光波段的激光输出，被国际上誉为“中国牌”晶体。但继1978年非线性光学材料的阴离子基团理论建立以来，非线性光学材料的理论研究长达40多年无实质性突破，导致了新型实用晶体的研发滞后。当前，基于功能基元及材料基因组学概念的理论研究是探索材料构效关系的新范式。然而，如何从一般性的原理出发，基于材料基本组成和结构来寻找非线性光学现象的起源并没有成熟的方案。

基于中科院战略性先导科技专项、科技部“973”计划、科技部国家重点研发计划重点专项、国家自然科学基金等的资助，在中科院院士洪茂椿领导下，福建物构所结构化学国家重点实验室邓水全课题组提出了具有普遍适用性的部分响应理论方法，建立了原子尺度的非线性光学原子响应理论。作为一个示例，利用第一性原理计算及理论模型分析，研究了深紫外非线性光学晶体LiCs₂PO₄，发现其倍频效应的主要来源是金属中心离子基团CsO₆以及LiO₄，而不是传统认为的非金属中心基团PO₄。研究表明占据态的O-2p与Cs-5p轨道以及非占据态的Cs-5d以及Li-2p轨道均对倍频效应有着重要贡献。非线性光学原子响应理论是阴离子基团理论建立以来该领域的重大突破。该理论揭示了轨道的可极化特征及长期被忽略的非占据态轨道对倍频效应的重要作用，从全新的角度诠释了非线性光学倍频效应，对理解非线性光学材料的微观机理以及功能导向的材料设计具有重要科学意义。该研究成果发表在《德国应用化学》上(Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 3933)，并被该杂志选为VIP文章。



福建物构所非线性光学原子响应理论研究取得进展

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](http://iikx.com)转发