
科学家提出日盲紫外非线性光学晶体协同设计新策略

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39572.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！

科学家提出日盲紫外非线性光学晶体协同设计新策略。

日盲紫外非线性光学晶体在紫外激光频率转换、精密探测等领域具有重要应用价值。该类材料需同时具备非中心对称结构、适中双折射和宽光学带隙，但三者协同优化长期面临技术挑战。

近日，中国科学院新疆理化技术研究所研究团队提出“局域构象限域+偶极工程”协同设计策略。研究通过将柔性丙二酸根整合为六元环[C₃H₂O₄BFR]⁻（R=F，Me，CF₃），固定羧酸共轭单元的相对取向，同时利用硼位取代基调控阴离子基元偶极矩，有效抑制反平行偶极排列，促进非中心对称结晶，为高性能日盲紫外非线性光学晶体设计提供新思路。

研究团队围绕NaMaBF₂、NaMaBFMe和NaMaBFCF₃三个体系开展系统研究。理论计算表明，整合形成的六元环有效限制了羧酸

因偶极相互作用减弱，形成非中心对称结构，而NaMaBF₂则呈现中心对称特性。

性能测试显示，NaMaBFMe晶体表现出优异特性。基于Sellmeier方程拟合，该晶体在多个主平面均支持I型和II型相位匹配，相位匹配波长覆盖整个透过窗口，展现出在全固态紧凑型紫外激光系统中的应用潜力。

机理研究揭示，六元环结构在几何和电子层面协同增强

电子离域。轨道分辨SHG密度分析表明，该阴离子基元是二次谐波响应的核心活性发色团。

研究建立了从局域结构到晶体堆积再到宏观光学性能的构效关系模型，为开发新型半有机极性功能材料提供可迁移的设计范式。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（JACS）上。研究工作得到国家自然科学基金、中国科学院战略性先导科技专项等的支持。

[论文链接](#)

局域构象限域与偶极工程双策略协同设计日盲紫外非线性光学晶体

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](http://www.iikx.com)转发