

# 无机聚合物结构双氟磷腈的深紫外非线性光学性能理论研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

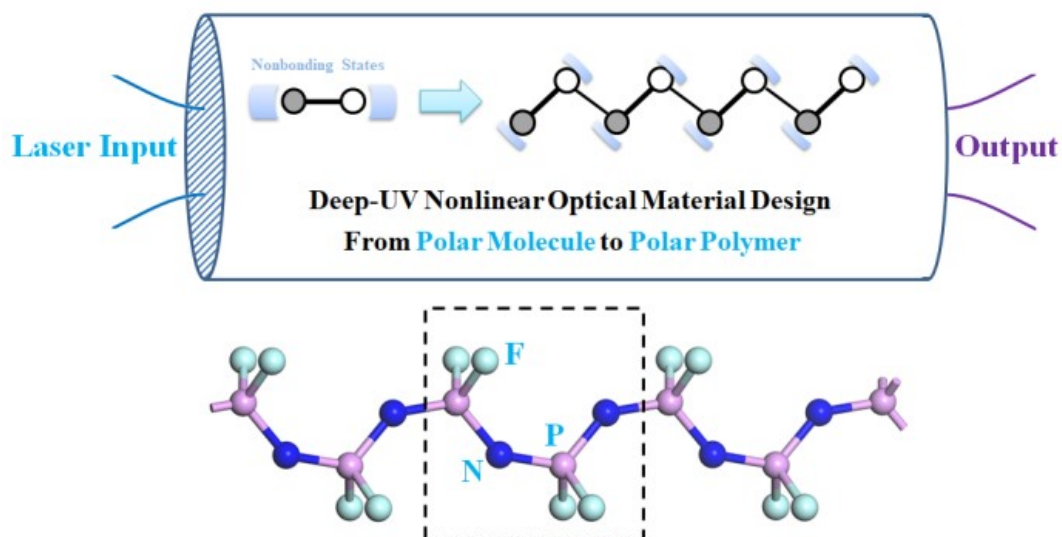
本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5779.html>

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！

Be<sub>2</sub>BO<sub>3</sub>F<sub>2</sub>(KBBF)???

按照阴离子基团理论，深紫外非线性光学性能之所以罕有，是因为大部分阴离子基团的光学带隙和双折射率不能同时满足充分大的条件。因此，大部分非线性光学结构要么带隙较小(比如 BaB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>晶体)而无法有效透过深紫外激光，要么双折射过低(比如LiB<sub>3</sub>O<sub>5</sub>晶体)而不能实现倍频过程所必须的相位匹配。所以，为了获得优良的深紫外非线性光学材料，研究者们一直想获得既具有超大带隙，又拥有充分双折射，同时还能呈现足够非线性光学效应的晶体结构。

近日，中国科学院理化技术研究所研究员林哲帅与北京计算科学研究中心博士康雷、研究员黄冰合作，通过将具有一维链状特征的极性基团整合到准一维的极性聚合物长链结构中，从而既有效地扩展了非线性光学体系的结构各向异性(从而增大双折射率)，又较大地饱和了结构中的非键轨道(从而提高光学带隙)。在此设计策略的指导下，研究者系统地聚焦到了具有极性链状排列的磷腈聚合物体系，并成功地在晶体数据库中找到了一种已被实验报到的无机晶型聚合物结构——双氟磷腈PNF<sub>2</sub>——其结构非常符合该工作的研究者关于深紫外非线性光学聚合物材料的理论构想。而且系统的理论计算显示，双氟磷腈呈现了较大的晶体带隙(7.8~8.7电子伏)，较大的倍频效应(1.2~1.9倍KBBF)，较大的双折射率(0.10~0.16在400纳米)，以及较短的深紫外倍频输出波长(142~158纳米)，是一个在深紫外非线性光学的理论性能上略优于KBBF晶体的材料。值得注意的是，双氟磷腈是第一个具有深紫外非线性光学性能的非氧化物材料和聚合物材料。作为一个前瞻性的理论工作，其为深紫外非线性光学材料的研究提供了一个新的研究思路和策略参考。相关结果发表在《德国应用化学》上(Angew. Chem. Int. Ed. 10.1002/anie.201905025)。



无机聚合物结构双氟磷腈的深紫外非线性光学性能理论研究取得进展

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://www.iikx.com)转发