

新疆理化所含钒氧基元的钒硼酸盐晶体的理论研究获进展

文章来源: 新疆理化技术研究所 发布时间: 2015-01-30 【字号: 小 中 大】

我要分享

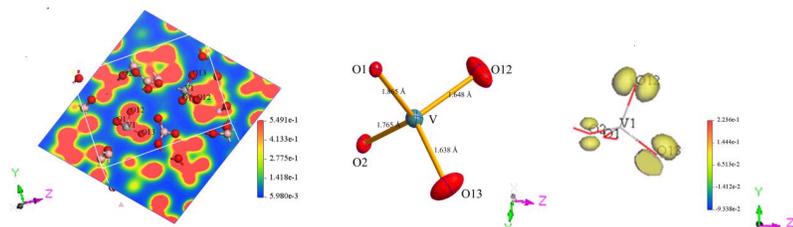
激光光源的波长拓展很大程度上依赖于频率转换器件材料——非线性光学晶体的变频能力。随着激光在紫外和深紫外波段应用的日益重要, 如何设计合成性能更优的硼酸盐非线性光学材料以及硼酸盐以外的紫外和深紫外非线性光学材料是当前研究的重点和热点。

在国家自然科学基金及科技部“973”等项目支持下, 中国科学院新疆理化技术研究所光电功能材料实验室与台湾淡江大学教授李明宪合作, 深入研究硼氧基团和钒氧基团结合的钠钒硼酸盐 $Na_3VO_2B_6O_{11}$, 发现这一非线性光学材料的倍频效应主要来源为畸变的 $(VO_4)^{3-}$ 基团而非 $(BO_3)^{3-}$ 基团。在非线性材料中为人熟知的畸变四面体有 $(PO_4)^{3-}$, $(SiO_4)^{4-}$, $(ZnO_4)^{4-}$, 和 $(AlO_4)^{5-}$ 基团, 但这些基团为其所在的非线性材料中对于材料的二次谐波效应远小于材料中 $(BO_3)^{3-}$ 基团。

为定量分析采用倍频电荷权重和实空间原子切割的方法证实 $Na_3VO_2B_6O_{11}$ 晶体中的 $(VO_4)^{3-}$ 基团是除BIBO和 $YAl_3(BO_3)_4$ (YAB) 晶体中的 $(BiO_4)^{5-}$ 和 $(YO_6)^{9-}$ 基团的又一种主导材料效应的贡献来源。该研究成果拓展了紫外非线性光学晶体材料研究的对象, 为设计寻找新的非线性光学材料提供了一个思路。

该研究成果已发表在*Phys. Chem. Chem. Phys.*, DOI: 10.1039/C4CP04248D。

文章链接



$Na_3VO_2B_6O_{11}$ 晶体中畸变 $(VO_4)^{3-}$ 基团的电荷密度图, 热振动图以及倍频电荷密度权重分布

附件:

(责任编辑: 叶瑞优)

热点新闻

李克强: 促进科技与大众创业万...

- 中科院“率先行动”计划组织实施方案
- “中国科学院科技创新年度巡展2015”在...
- 中科院与北京市海淀区领导会谈
- 中科院党组2015年夏季扩大会议在京召开
- 中科院党组专题学习“三严三实”

视频推荐



【新闻联播】“率先行动”计划 领跑科技体制改革

【东方卫视】中科院携手阿里共建量子实验室 研制量子计算机

专题推荐



相关新闻

