

- [KDP晶体增透膜和保护膜性能研究](#)
- [腔内倍频法测量KDP类晶体损耗系数](#)
- [二次谐波转换对激光脉宽影响的实验研究](#)
- [KDP晶体的杂质与光学性能分析](#)
- [季铵盐对KDP晶体的光学特性影响](#)
- [\[PDF全文\]](#)
- [\[HTML摘要\]](#)
- [发表评论](#)
- [查看评论](#)

ICF与激光等离子体

用第一性原理研究K空位对KDP晶体激光损伤的影响

[王坤鹏](#) [张建秀](#) [房昌水](#) [于文涛](#) [王圣来](#) [顾庆天](#) [孙洵](#)

(山东大学 晶体材料国家重点实验室, 济南 250100)

摘要: 用基于密度泛函理论及超软赝势的第一性原理研究了 KH_2PO_4 (KDP) 晶体中K空位的电子结构、形成能及弛豫构型。讨论了K空位形成后电荷密度的重新分布、相应的电子态密度和能带结构等性质。计算得到中性K空位的形成能为6.5 eV, 远小于间隙K原子点缺陷形成能13.07 eV。K空位的存在使晶胞体积增大, 分别沿结晶学轴a方向增大近0.8%, b方向增大近0.87%, c方向增大近1.2%, 同时使与之配位的8个氧原子发生较大位移, 使这8个氧形成的空腔体积增大近3.2%。空腔体积的增大不仅促进了各种点缺陷的扩散迁移, 而且有利于其它杂质原子的填隙。K原子迁移率的增大会引起离子电导率的增大, 因而会降低KDP的激光损伤阈值, 因此从这个方面讲, K空位的存在是不利的。但是如果能从实验上(如热退火)利用K空位所造成的扩散通道排出或改善缺陷结构, 则可提高KDP晶体的光学质量。

关键词: [KDP晶体](#) [K空位](#) [激光损伤](#) [第一性原理](#)

收稿日期

修回日期

通讯作者 pengwan1545@yahoo.com.cn

DOI

分类号