

## 無機非線形光学材料の分子軌道法を用いた研究

佐々木沙織、○内田 希（長岡技科大）

## 1. 緒言

フレスノイト型構造を持つ  $\text{Ba}_2\text{TiGe}_2\text{O}_8$  (BTG) 結晶は、極めて大きな二次高調波発生 (SHG) を示すことが明らかとなり、新たな無機非線形光学材料として注目されている。実験からはこの結晶は外部応力に応答して SHG の大きさが変化することが示唆されており、新たなデバイス開発の可能性から結晶の構造パラメータと非線形光学特性の関係を明らかにする必要がある。

本研究では BTG フレスノイト型結晶内で非線形光学特性に深く関わるとされる  $\text{TiO}_5$  ユニット内の C 軸方向 Ti-O 結合距離と単位格子の C 軸長さの二つをパラメータとし分子軌道法を用いて二次高調波発生の強度との関係を明らかにすることを目的とした。

## 2. 計算方法

BTG フレスノイト型結晶において非線形光学特性の根源は二つの  $\text{TiO}_5$  ユニット構造にある。よって図 1 に示すような二段の BTG のクラスタを作製し、これを用いて BTG 構造中の  $\text{TiO}_5$  ユニット内の C 軸方向における Ti-O 距離と単位格子の C 軸長さをパラメータにとり、二次光学非線形性の指針の一つである超分極率  $\beta$  の値を半経験的分子軌道法 (WinMOPAC3.9) によって求めた。

さらに一段、二段、三段と積層数を増加させた場合や違う元素で置換した場合の超分極率についても計算を行った。

## 3. 結果および考察

計算結果を図 2 に示す。図より、 $\text{TiO}_5$  ユニット内の C 軸方向における Ti-O 結合距離が収縮し、単位格子の C 軸長さが伸長するとき二次光学非線形性が大きくなることが確認された。また、積層数を二段、三段と増していくと、超分極率  $\beta$  の値が二次関数的に増大することが示され、結晶が C 軸方向に伸びれば伸びるほど SHG が大きくなることが示唆された。

他の計算結果については、ポスターに示す。

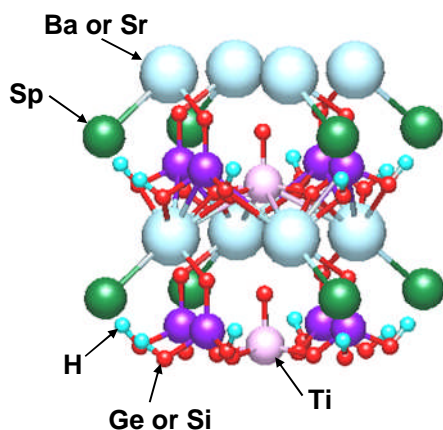
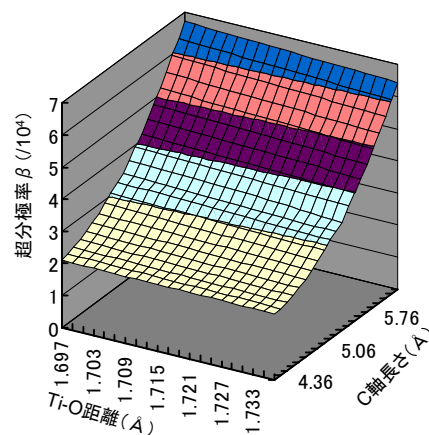


図 1. 二段の BTG 構造

図 2. BTG 構造中の  $\text{TiO}_5$  ユニット内の構造因子と非線形光学特性