

# 氟硼酸盐非线性光学晶体材料研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院福建物质结构研究所

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/1013.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！**

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非线性光学材料是当前研究的重点和热点。

中国科学院福建物质结构研究所光电材料化学与物理重点实验室叶宁课题组在国家杰出青年基金、中科院B类战略性先导科技专项和助理研究员罗敏主持的海西研究院春苗人才专项等资助下，以非线性光学晶体 $\text{Sr}_2\text{Be}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (SBBO)结构模型为基础，利用分子工程的方法成功设计了首例铅/锡氟硼酸盐化合物 $\text{MB}_2\text{O}_3\text{F}_2$ ( $\text{M}=\text{Pb}, \text{Sn}$ )。

相比于SBBO中存在的刚性 $[\text{Be}_6\text{B}_6\text{O}_{15}]$  双层来说， $\text{MB}_2\text{O}_3\text{F}_2$ 具有灵活的二维 $[\text{B}_6\text{O}_{12}\text{F}_6]$  单层，克服了SBBO结构的不稳定性问题(图1)。此外，虽然 $\text{MB}_2\text{O}_3\text{F}_2$ ( $\text{M}=\text{Pb}, \text{Sn}$ )是同构的，并且都含有立体化学活性的孤对阳离子，但它们却表现出截然相反的宏观倍频效应。通过与中科院理化技术研究所林哲帅课题组合作，利用第一性原理的计算方法揭示了两个化合物倍频的差异主要是由于Pb和Sn的倍频活性轨道各向异性的不同，它们分别对 $\text{PbB}_2\text{O}_3\text{F}_2$ 和 $\text{SnB}_2\text{O}_3\text{F}_2$ 的倍频效应产生了建设性和破坏性的影响(图2)。

相关研究成果发表在《美国化学会志》上(*Journal of the American Chemical Society*, 2018, 140(22), 6814-6817)。此外，该研究团队此前在紫外、深紫外NLO材料的设计、合成、晶体生长和非线性性能研究方面也取得系列研究进展，相关成果发表于*J. Am. Chem. Soc.*, 2018, 140, 3884; *Chem. Commun.*, 2018, 54, 1445; *Chem. Commun.*, 2017, 53, 9398; *J. Mater. Chem. C*, 2017, 5, 8758; *Chem. Mater.* 2017, 2, 896; *Chem. Mater.* 2016, 28, 9122; *Chem. Mater.* 2016, 28, 2301; *Chem. Mater.* 2015, 27, 7520。(来源：中国科学院福建物质结构研究所)

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