

新疆理化所等在拓展硼酸盐结构化学取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13858.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！

硼酸盐因具有丰富的结构类型、稳定的物化性能，在新型光电功能晶体材料、核废料分离和隔离、商业化玻璃、非晶态氧化物催化剂、锂/镁离子电池等领域具有重要应用。近90年来，研究人员相继发现近4000种硼酸盐化合物，而其结构化学作为调控性能的关键，决定着硼酸盐物理、化学性能的极限，也使得硼酸盐结构化学和构效关系研究成为该领域的热点。理论上，硼酸盐结构中B原子可以与O亲核体通过sp、sp²和sp³杂化作用，形成直线型BO₂、三角形BO₃

和四面体的BO₄

基本基团。但近4000种硼酸盐化合物中，

关于直线型BO₂

基团鲜有报道，目前仅在极少数磷灰石矿物中发现该类基团，是十分罕见的硼酸盐的基本构筑单元，因此对该类基团的研究较为滞后。近日，中国科学院新疆理化技术研究所中科院特殊环境功能材料与器件重点实验室研究团队与美国西北大学研究团队联合发表的研究成果打破了该格局。

中国科学院新疆理化技术研究所中科院特殊环境功能材料与器件重点实验室研究员潘世烈研究团队长期以研究硼酸盐晶体结构多样性，并进一步设计合成硼酸盐光学晶体为主要任务和目标。近日，科研人员获得一例硼酸盐新化合物K₅Ba₂(B₁₀O₁₇)₂(BO₂

)，该化合物结构中具有直线型BO₂基团，是目前首例含有全部B-O键合构型的硼酸盐化合物。科研人员通过固体核磁共

振实验结合理论计算，鉴定出其结构中存在的B

O₂

基团，为

今后该类基团的鉴

别提供了原始参考。通过第一性原理

阐明，相较于传统BO₃和BO₄基团，BO₂

基团具有更高的光学各向异性，基于此

设计的仅含有BO₂基团K(BO₂)具有较大的双折射率(0.18@1064 nm)，将深紫外双折射晶体的双折射率值推向了新

高度，为设计合成高性能双折射晶体提供

了新基因。K₅Ba₂(B₁₀O₁₇)₂(BO₂

)的发现拓展了硼酸盐的结构化学，而其中

罕见的BO₂

基团的独特微观性能和光谱特征将激发广泛研究，并为未来探索紫外/深紫外光学晶体材料开辟新路径。

相关研究成果发表在Nature

Communications上，新疆理化所为第一完成单位，潘世烈和美国西北大学教授Kenneth R.Poeppl
meier为论文共同通讯作者，新型光电功能材料实验室博士黄春梅、米日丁·穆太力普和研究员
张方方为论文共同第一作者，论文合作者包括英国兰卡斯特大学教授John M.
Griffin、美国西北大学博士Kent J. Griffith、新疆理化所研究员杨志华和博士胡聪。研究工作得到
国家自然科学基金委员会、科技部、中科院等项目的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：新疆理化技术研究所

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](#)转发