

新疆理化所关于羟基化平面型硼氧基元组装设计深紫外双折射晶体的研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/18365.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！

双折射晶体在光通信和激光工业中对偏振光的调制起到重要作用。目前，有数种双折射晶体已商业化应用，但可应用于深紫外波段的双折射晶体有限，深紫外双折射晶体的发展面临挑战。

通常实现晶体大双折射的方法主要有：金属阳离子增益（引入易产生二阶Jahn-Teller效应和高极化的 d^{10} 金属阳离子等）和功能阴离子基团增益（引入具有大的极化率各向异性的平面型功能基团，如 $[BO_3]$ 、 $[B_3O_6]$ 、 $[CO_3]$ 、 $[NO_3]$ 等）。其中，硼酸盐具有短的紫外截止边，在深紫外区透过有独特优势，因此聚焦硼酸盐基双折射晶体材料和寻找新的性能优异的硼酸盐功能基团对设计和发展深紫外双折射晶体具有重要意义。

中国科学院新疆理化技术研究所新型光电功能晶体材料团队致力于硼酸盐新型紫外、深紫外光学晶体的研究。近日，该团队提出羟基化的平面型 π 共轭的 $[B(OH)_3]$ 和 $[B_3O_3(OH)_3]$ 可作为一种高效的双折射活性基团用于设计深紫外双折射晶体材料。研究将氢原子引入到 $[BO_3]$ 和 $[B_3O_6]$ 基团中，有利于消除 $[BO_3]$ 和 $[B_3O_6]$ 基团中终端氧原子的非键态，增大HOMO-LUMO带隙；羟基的引入使 $[BO_3]$ 和 $[B_3O_6]$ 基团中离域 π 轨道上的 π 电子更加弥散，有利于增大微观基团的极化率各向异性； $[B(OH)_3]$ 和 $[B_3O_3(OH)_3]$ 基团作为中性分子具有相似的配位环境和空间构型，有利于它们在结构构筑中呈现自由灵活的组装模型。

基于该功能

基团通过合理设计与组装，该团队首次合成了四例新的羟基硼酸盐—— $\text{Cs}_3[\text{B}(\text{OH})_3]_2\text{Cl}_3$ (CBHC-I)、 $\text{CsB}_3\text{O}_3(\text{OH})_3\text{Cl}$ (CBHC-II)、 $\text{Cs}[\text{B}(\text{OH})_3][\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_3]\text{Cl}$ (CBHC-III)和 $\text{Rb}_3[\text{B}(\text{OH})_3][\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_3]_2\text{Cl}_3$ (RBHC)。在它们的结构中， $[\text{B}(\text{OH})_3]$ 和 $[\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_3]$ 功能基团都呈现出非常一致的共平面排列，有利于产生大的双折射率（0.057-0.123@532 nm）。此外，这些化合物采用传统的水溶液法制备，合成条件温和（溶剂挥发法，低于80°C），并表现出短的深紫外截止边（180 nm）。研究表明，基于 π 共轭的 $[\text{B}(\text{OH})_3]$ 和 $[\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_3]$ 功能基团的灵活组装为设计合成新的深紫外双折射晶体材料提供了新思路。

相关研究成果以VIP（Very Important Paper）的形式，发表在《德国应用化学》上。研究工作得到中科院青年创新促进会、国家自然科学基金、新疆维吾尔自治区自治区重大专项等的支持。

[论文链接](#)

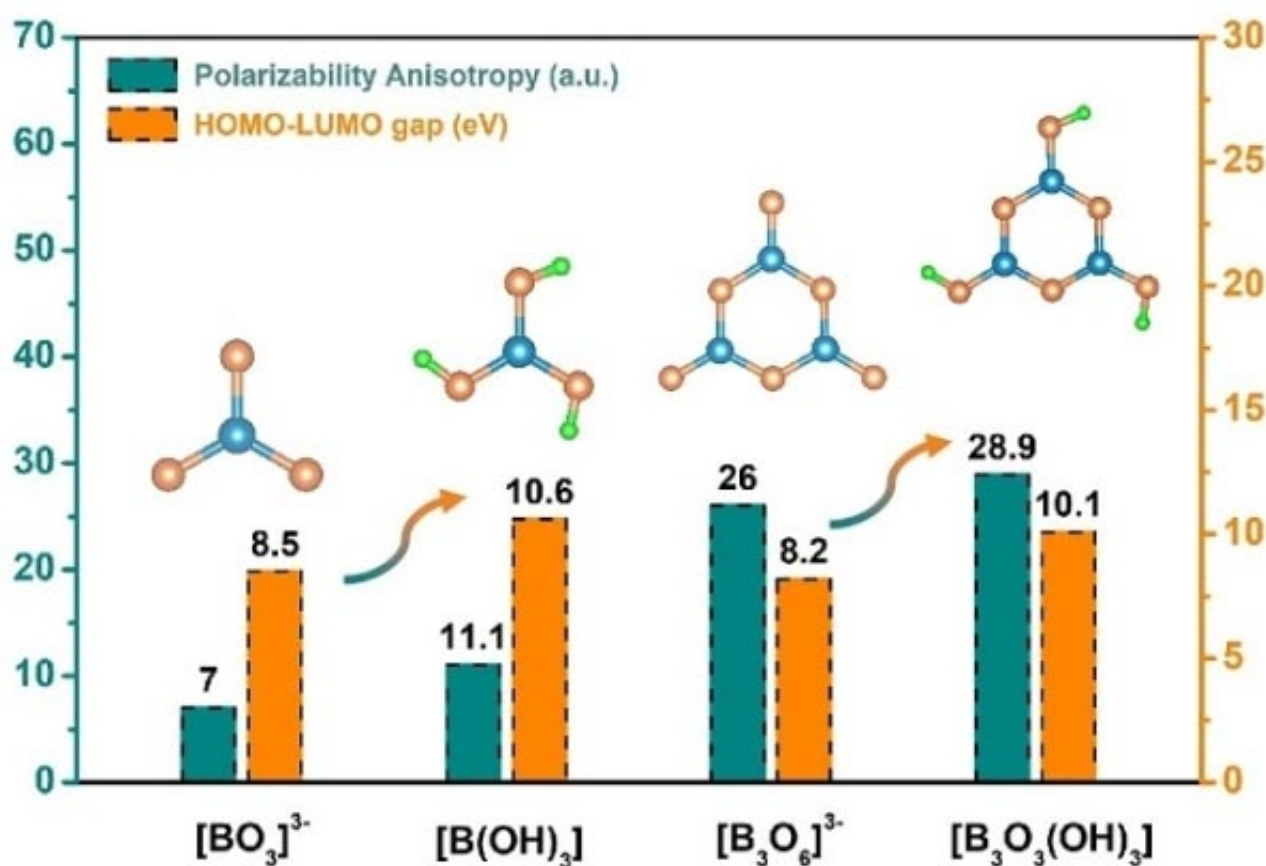


图1. $[\text{BO}_3]$ 、 $[\text{B}(\text{OH})_3]$ 、 $[\text{B}_3\text{O}_6]$ 和 $[\text{B}_3\text{O}_3(\text{OH})_3]$ 基团的极化率各向异性和HOMO-LUMO带隙

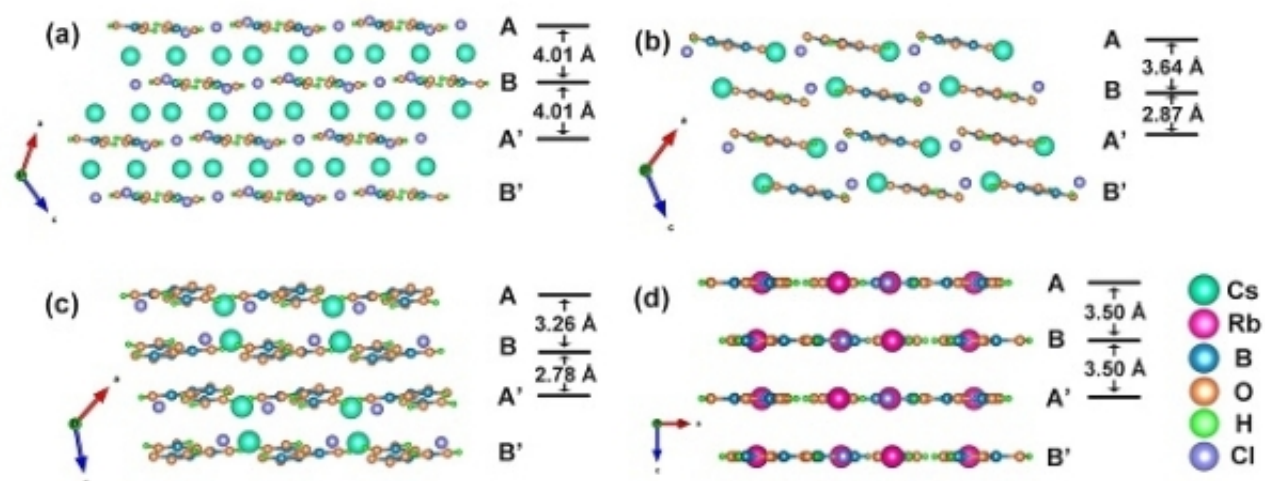


图2.CBHC-I、CBHC-II、CBHC-III和RBHC的晶体结构

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](https://www.iikx.com)转发