
福建物构所碘酸盐二阶非线性光学晶体的设计与合成获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3600.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！

福建物构所碘酸盐二阶非线性光学晶体的设计与合成获进展。近年来，具有非中心对称的无机晶体材料，基于它们可能存在的二阶非线性、铁电、压电和热释电性能而受到广泛关注。金属碘酸盐晶体因具有较强的倍频效应、较宽的透过波段、较高的热稳定性和光学损伤阈值在二阶非线性光学晶体材料领域占有非常重要的地位。设计二阶非线性光学材料的关键是如何诱导无心结构的形成及如何增加化合物的极化率同时保留大的带隙。最近研究表明，简单的双原子位置的不等价取代的方法是一种设计新的高性能倍频晶体的新思路。

在国家基金委重点和面上项目、重大研究计划培育项目以及中国科学院战略性先导科技专项等的资助下，中科院福建物质结构研究所结构化学国家重点实验室研究员毛江高团队提出了三原子位置的不等价取代方法，以 $\text{Ba}_2[\text{VO}_2\text{F}_2(\text{IO}_3)_2](\text{IO}_3)$ 为母体化合物，利用 Ga^{3+} 取代 V^{5+} ，同时以两个 F^- 取代两个 O^{2-} ，设计合成了两例新颖的碘酸盐倍频晶体， $\text{Ba}_2[\text{GaF}_4(\text{IO}_3)_2](\text{IO}_3)$ 。

$\text{Ba}_2[\text{GaF}_4(\text{IO}_3)_2](\text{IO}_3)$ 保留了具有较强极化率的拓扑结构， $[\text{GaF}_4(\text{IO}_3)_2]^{3-}$ 聚阴离子基团和孤立的 IO_3^- 基团排列较为整齐，因此具有大的粉末倍频效应 ($\sim 6 \times \text{KDP}$)，同时，因为后主族元素 Ga 和强电负性 F^- 离子的引入，同母体化合物相比，大大扩宽了晶体的带隙，从而增强了其激光损伤阈值 (4.61 eV, $29.7 \times \text{AGS}$ and 4.35 eV, $28.3 \times \text{AGS}$)。实验结果表明，这两个晶体在紫外到中红外波段具有很强的透过性能，具有潜在的应用价值。同先前的双原子位置不等价取代方法相比，三原子位置的不等价取代利用了中心金属阳离子化合价相差为 2，实现了从 d^0 过度金属八面体到非 d^0 过度金属八面体的转化，这一转变十分有望扩展二阶非线性光学晶体的研究体系和材料种类。这种三原子位置的不等价取代有望成为一条简便有效的无机非线性光学晶体材料的设计方法。

相关结果发表在《德国应用化学》(Angewandte Chemie International Edition) 上，文章第一作者为博士生陈瑾 (DOI: 10.1002/anie.201813968R1)。

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