
福建物构所金属磷酸盐倍频晶体的设计与合成研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5681.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！

福建物构所金属磷酸盐倍频晶体的设计与合成研究获进展。金属磷酸盐NLO晶体具有深紫外透过、较高的热稳定性以及易于大尺寸晶体生长的特性。在该体系中，利用磷酸根的缩合、引入强畸变的d⁰-TM(过渡金属)多面体以及引入易于极化的阳离子框架(Cd²⁺、Pb²⁺、Bi³⁺等)等设计策略，无机材料学家们获得了一系列磷酸盐非线性光学晶体材料。其中，KH₂PO₄ (KDP)和KTiOPO₄ (KTP)作为商用NLO材料已被广泛应用于各种非线性光学器件。然而，由于磷酸根的高对称性，其极化率低以及各向异性小，因此多数已有的磷酸盐晶体存在二阶非线性光学效应弱以及双折射率小的缺点，严重限制了它们的实际应用。

在国家基金委面上项目、中国科学院战略性先导科技专项等资助下，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将具有高极化能力的Hg²⁺引入到磷酸盐中，通过利用温和的水热反应，合成了一例化学组成简单的磷酸盐倍频晶体：LiHgPO₄。

LiHgPO₄结晶于极性空间群P-42m。其中Hg²⁺形成了高度畸变的HgO₆八面体，与PO₄四面体通过共用氧原子形成[HgPO₄]_∞双层结构。这种HgO₆八面体使得该化合物具有较高的极化率和各向异性，因此LiHgPO₄表现出强的倍频效应和较大的双折射率，其倍频系数为KDP的11倍，双折射率为0.068。理论计算表明，HgO₆八面体对于LiHgPO₄的倍频性能和光学各向异性均做出了很大的贡献。该研究结果为新型高性能磷酸盐NLO晶体的设计合成提供了一条新的策略。

相关结果在线发表在《美国化学会志》(J. Am. Chem. Soc. DOI: 10.1021/jacs.9b05125)上，文章第一作者为上海科技大学/福建物构所联培硕士生吴宝林。

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