

新疆理化所氟化硼酸盐预测研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6035.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！

新疆理化所氟化硼酸盐预测研究取得进展。基于第一性原理计算的结构最优搜寻为探索新型材料提供了有效手段。为缩短材料制备的研发周期，中国科学院新疆理化技术研究所新型光电功能晶体实验室研发团队建立了从材料软件研发、材料基因筛选及预测、材料设计、第一性原理计算和结构预测到设计制备的材料集成研究系统。

研究所新型光电功能材料研发团队开展无机深紫外非线性光学材料结构预测研究以来，在紫外/深紫外、中远红外非线性光学材料预测及设计方面取得了系列成果。包括到目前为止第一例达到了深紫外非线性光学材料初步评估要求的磷酸盐 $-YSc(PO_4)_2$ (J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 10726)、计算相位匹配波长可到深紫外区的 $NaBeBO_3$ 深紫外非线性光学材料 (Sci. Rep. 2016, 6, 34839)、计算相位匹配波长长达 152 nm 深紫外非线性光学材料 $-Be_2BO_3F$ (Inorg. Chem. 2018, 57, 5716)、首例具有高的热导率红外非线性光学材料 $NaGaS_2$ (Inorg. Chem. 2019, 58, 93) 等。

近期，该团队提出并首次在实验上证明 $[BO_xF_{4-x}]$ 基团为深紫外优势基团，引入其可构建有利于产生大双折射的结构，同时产生大的倍频效应和短的紫外截止边。遵循这一策略，研究人员设计合成了一系列具有优异性能的氟硼酸盐深紫外非线性光学材料，包括 $NH_4B_4O_6F$ 、 CsB_4O_6F 、 RbB_4O_6F 、 $CsKB_8O_{12}F_2$ 、 $CsRbB_8O_{12}F_2$ 、 $MB_5O_7F_3$ (M=Ca, Sr) 等。在此基础上，该团队进一步设计组装 $[BO_xF_{4-x}]$ 基团，证明了由 $[BO_xF_{4-x}]$ 基团组成的微观基团在平衡“带隙-倍频效应-双折射率”方面的优势，以此设计并预测了分子式为 $BaB_2O_3F_2$ 非线性光学材料 (Chem. Mater. 2019, 31, 2807-2813)，其中 $BaB_2O_3F_2-I$ 被该团队通过实验证实。所有预测的结构均表现出大带隙 (8.1-9.0 eV)，四个非中心结构的 $BaB_2O_3F_2$ 含有与 $NH_4B_4O_6F$ 等类似的层结构，倍频效应均大于 3 倍 KDP。特别是通过第一性原理计算发现，阴离子基团仅有 BO_3F 的 $BaB_2O_3F_2-IV$ 和 $BaB_2O_3F_2-V$ 倍频效应高达 4 倍 KDP，直接证明了 BO_3F 阴离子基团有利于产生大倍频效应。

该系列研究成果发表在《化学材料》(Chem. Mater., 2019, 31, 2807) 及《德国应用化学》(Angew. Chem. Int. Ed., 2019, DOI: 10.1002/anie.201905558)，并被选为《化学材料》封面进行报道。该研究工作得到国家自然科学基金委、新疆维吾尔自治区创新团队项目等的资助。

论文链接：12

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://iikx.com)转发