

福建物构所红外NLO晶体材料的结构设计获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/9951.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！

红外非线性光学（NLO）晶体材料在军事和民用领域具有重要的应用（如激光雷达、激光通讯、红外遥测、光电对抗等）。其中非中心对称晶体结构是实现二阶NLO效应的前提条件。目前虽然总结了一系列获得非中心对称结构的方法，但如何理性设计非心结构仍然是一个挑战性的课题。

在中国科学院战略性先导科技专项、国家自然科学基金等的资助下，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郭国聪领导的研究团队为了获得非中心对称结构，创新性地采用聚阳离子基团取代诱导NLO功能基元有序排列(polycation-substitution-induced NLO-functional motif ordering) 的结构设计策略，通过非中心对称阳离子基团 $[\text{ClRb}_2\text{Ba}_3]^{7+}$ 取代 RbGaS_2

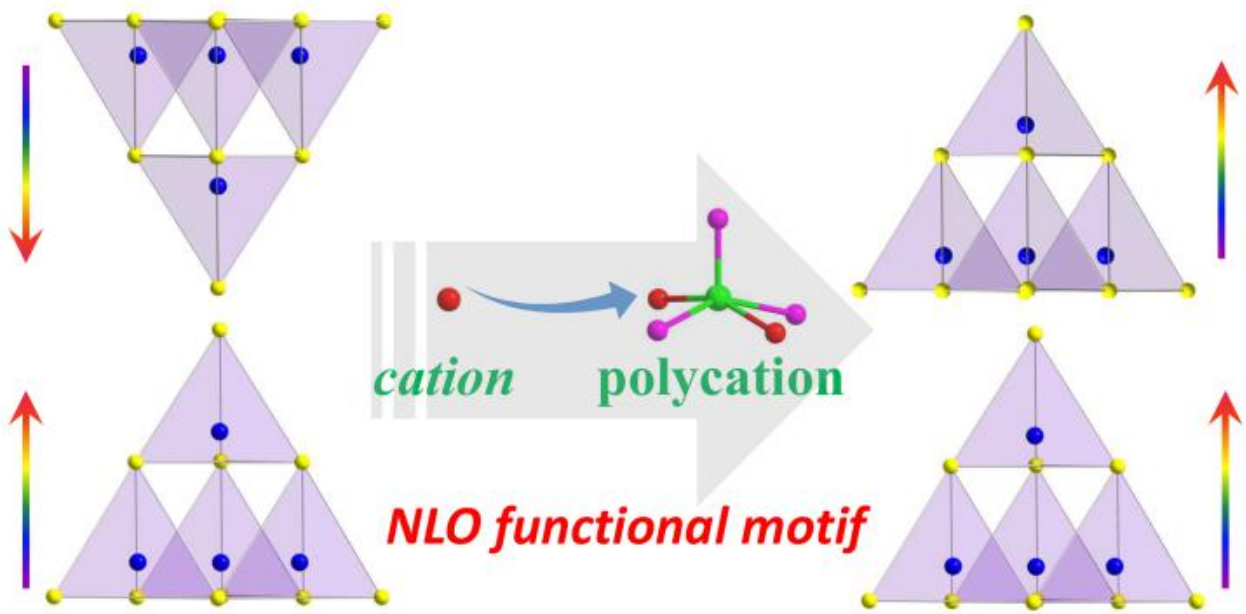
(C2/c)中的 Rb^+ 离子，诱导 Ga_4S_{10}

超四面体NLO功能基元从反平行到正向平行排列，成功获得了非心结构化合物 $[\text{ABa}_2\text{Cl}][\text{Ga}_4\text{S}_8]$ ($\text{A} = \text{Rb}, 1; \text{Cs}, 2$)。这是首次通过聚阳离子基团取代诱导实现中心到非心结构的转变，为探索新型NLO材料提供了新的研究思路。另外，化合物1和2具有强的倍频（SHG）信号（ $10.4\text{-}15.3 \times \text{KDP}$ @1064 nm; $0.9\text{-}1.0 \times \text{AgGaS}_2$ @1910

nm）、高的激光损伤阈值（ $11\text{-}12 \times \text{AgGaS}_2$ ）、宽的红外透过范围（ $0.4\text{-}12.3$ um）及

满足相位匹配，有望作为同时覆盖可见至红外波段的NLO晶体材料。相关工作以 $[\text{ABa}_2\text{Cl}][\text{Ga}_4\text{S}_8]$ ($\text{A} = \text{Rb}, \text{Cs}$): Wide-Spectrum Nonlinear Optical Materials Obtained by Polycation-Substitution-Induced Nonlinear Optical (NLO)-Functional Motif Ordering 为题，发表在《美国化学会志》（J. Am. Chem. Soc. 2020, DOI:10.1021/jacs.0c04738），副研究员刘彬文为该论文第一作者，副研究员姜小明和研究员郭国聪为通讯作者。

此前，该研究团队在2001年首先提出“功能基元（functional motif）”的学术思想（Progress in Chemistry, 2001, 13, 151）；设计了新的红外NLO功能基元（Chem. Mater. 2017, 29, 9200）；突破了大NLO系数和高激光损伤阈值难兼得的瓶颈（Chem. Sci. 2016, 7, 6273）；获得最宽带隙硫属NLO晶体材料（Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 4856），提出实现相位匹配的新策略（CCS Chemistry, 2020, Accepted），并通过多种结构设计策略获得了多种高性能红外NLO新材料（J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 3410；Chem. Sci. 2018, 9, 5700；Adv. Optical Mater. 2018, 1800156；Chem. Mater. 2017, 29, 1796；Chem. Mater. 2015, 27, 8189）。



福建物构所红外NLO晶体材料的结构设计获进展

研究团队单位：福建物质结构研究所

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](http://www.iikx.com)转发