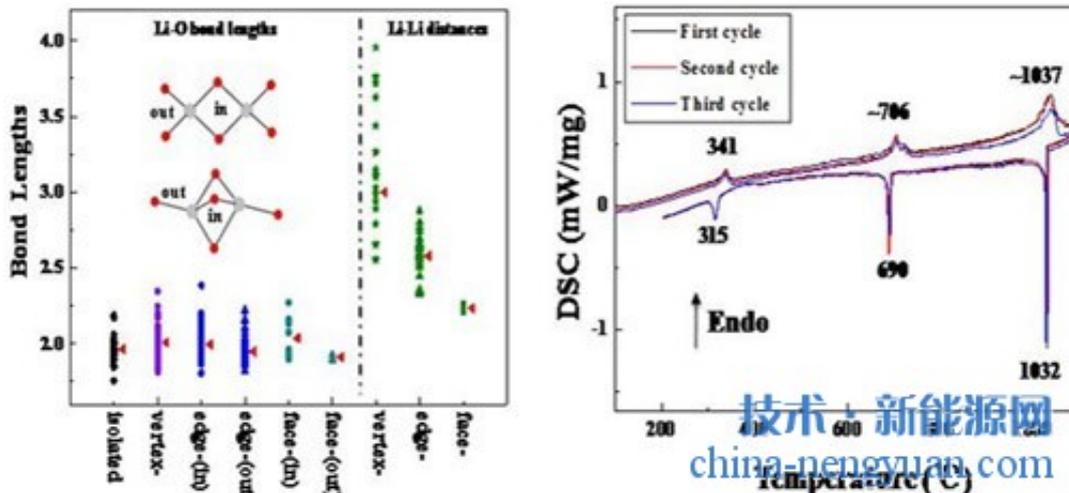


新疆理化所在设计合成新型硼酸盐光学晶体材料研究中获进展



硼酸盐具有丰富的化学结构，B原子可采用 BO_3 和 BO_4 两种配位方式，并进一步聚合成一维的链、二维的层和三维的网络，使硼酸盐具有丰富的晶体结构。因此，硼酸盐是设计合成新型光学晶体材料的优选体系。基于阴离子基团理论， BO_3 平面基元具有不对称电子云分布的共轭轨道，具有较大的微观极化率，平行排列的 BO_3 平面基元利于使材料获得好的倍频效应和双折射性质，这两个参数直接决定了材料的激光转换效率和倍频应用波段范围。

中国科学院新疆理化技术研究所新型光电功能材料研究团队在设计合成新型紫外光学晶体材料方面进行了系统的探索研究，通过大量实验，合成出具有新颖结构特点的硼酸盐 $Li_6Zn_3(BO_3)_4$ 。

该晶体结晶于三斜晶系P-1空间群，结构中含有近平面排列的孤立 BO_3 基团使其具有相对较大的双折射率（0.065@1064 nm）。该结构中首次报道了共面连接的 LiO_4 四面体。科研人员全面系统地总结了近100种含锂硼酸盐化合物，分析晶体结构Li-O多面体特性，归纳了Li-O配位阴离子基团种类和基团间的配位方式。研究发现，由于 LiO_4 四面体共面连接时Li-Li原子间存在较大的斥力，导致共面连接的 LiO_4 四面体情况非常罕见。此外，科研人员通过相关性测试发现， $Li_6Zn_3(BO_3)_4$ 在温度290 -360 和650 -770 范围有两个可逆相变，是一种潜在的相变材料。

相关研究成果作为封面文章发表在《无机化学前沿》（Inorganic Chemistry Frontiers）上。

该研究工作得到国家自然科学基金、新疆维吾尔自治区国际合作等的项目资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/111428.html>