

收藏本站 设为首页

English 联系我们 网站地图 邮箱 旧版回顾



面向世界科技前沿, 面向国家重大需求, 面向国民经济主战场, 率先实现科学技术跨越发展,  
率先建成国家创新人才高地, 率先建成国家高水平科技智库, 率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



官方微博



官方微信

首页 组织机构 科学研究 人才教育 学部与院士 资源条件 科学普及 党建与创新文化 信息公开 专题

搜索

首页 &gt; 科研进展

## 新疆理化所揭示倍频效应增益机制

文章来源: 新疆理化技术研究所 发布时间: 2015-08-01 【字号: 小 中 大】

我要分享

由于Pb具有活性的孤对电子, 利用其替代碱土金属硼酸盐中金属阳离子是一种增大材料倍频效应的有效方法。但并不是所有的Pb替代结构都可以使得材料倍频效应得到明显增益, 是什么原因导致了离子替代前后倍频效应增益显著不同?

针对上述问题, 中国科学院新疆理化技术研究所特殊环境功能材料与器件重点实验室光电功能晶体材料团队通过第一性原理等方法系统研究了Pb-碱土金属替代硼酸盐结构性能关系, 首次揭示了Pb-碱土金属替代致使倍频效应增益不同的微观机制, 并据此设计合成出第一例非中心对称结构的含孤立 $BO_3$ 的铅硼酸盐。

科研人员定义了两种Pb与 $BO_3$ 基团的连接方式, 即闭合式(closed)和开放式(opened)Pb-B-O环。分子轨道计算结果证明闭合的连接方式使得Pb的 $p$ 轨道和 $BO_3$ 基团的 $\pi$ 轨道杂化比开放式连接方式更强, 所以会对非线性光学性质具有更显著的贡献, 获得更大的倍频效应增益。结构分析发现仅含孤立 $BO_3$ 基团的结构会更易形成期望的闭合式结构, 另外大量研究发现Pb(II)离子与O原子的螯合会增强材料的倍频效应, 综合这两个原因, 科研人员设计并合成了含铅和孤立 $BO_3$ 基团的化合物 $Pb_2Ba_3(BO_3)_3Cl$ 。该化合物是第一例仅含有孤立 $BO_3$ 基团的铅硼酸盐, 经实验测试该化合物的倍频效应是KDP的3.2倍, 倍频效应增益高达6.4倍(较其同构化合物 $Ba_5(BO_3)_3Cl$ ), 且满足相位匹配条件。

为了深入研究倍频效应机理, 科研人员还利用第一原理方法揭示了 $Pb_2Ba_3(BO_3)_3Cl$ 具有较大倍频效应增益的内在机理, 提出了有利于获得较大倍频效应增益的主要原因是Pb(II)O多面体与 $BO_3$ 基团独特的共边连接方式。这一结论与理论预测的结论相吻合, 同时阐明了含孤立 $BO_3$ 基团的铅硼酸盐是可获得较大倍频效应增益的潜在化合物。

该研究成果已于近期发表在*J. Am. Chem. Soc.*上。相关研究工作得到国家“973”、国家自然科学基金、中科院“西部之光”项目、“千人计划”项目、自治区国际合作项目等项目资助。

论文链接

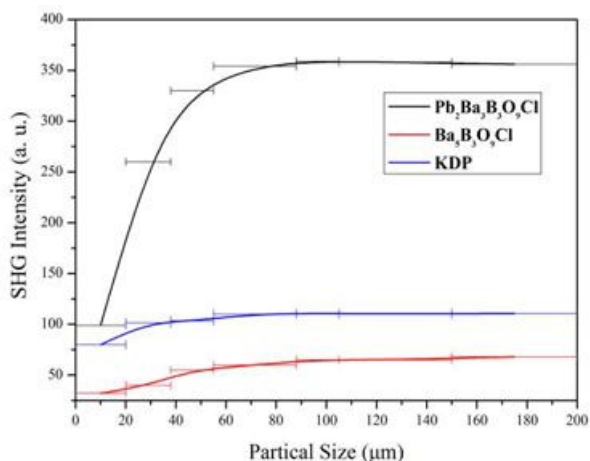


图 1:  $Pb_2Ba_3(BO_3)_3Cl$ ,  $Ba_5(BO_3)_3Cl$  在1064 nm的粉末倍频效应

### 热点新闻

#### 发展中国家科学院第28届院士大...

14位大陆学者当选2019年发展中国家科学...  
中科院举行离退休干部改革创新形势...  
中科院与铁路总公司签署战略合作协议  
中科院与内蒙古自治区签署新一轮全面科...  
发展中国家科学院中国院士和学者代表座...

### 视频推荐

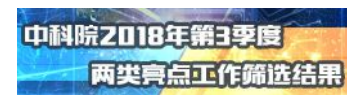


【新闻联播】“率先行动”计划 领跑科技体制改革



【共同关注】“首例基因编辑婴儿”事件: 中科院发表声明——坚决反对

### 专题推荐



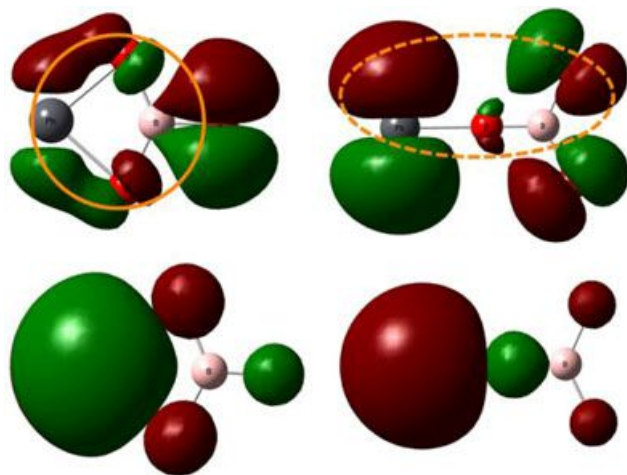


图2:  $PbBO_3$  封闭前沿轨道及开放Pb-B-O基团的前沿轨道对比图

(责任编辑: 叶瑞优)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们  
地址: 北京市三里河路52号 邮编: 100864