

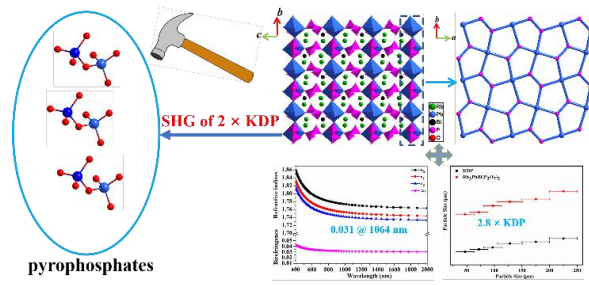
热烈祝贺陈兆慧研究员团队在 *Angew. Chem. Int. Ed.*上发表科研论文

新疆大学化工学院陈兆慧研究员团队近年来致力于新型光电功能晶体材料的研究及晶体生长工艺的优化。相关研究成果发表在《德国应用化学》(*Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, DOI: 10.1002/anie.202007494)上, 是我校首次以第一单位在《德国应用化学》上发表文章, 体现了我校科研水平的提升。新疆大学化工学院为第一完成单位, 2016 级研究生陆雪芳为第一作者, 陈兆慧研究员为通讯作者, 物理学院井群副教授提供了理论计算, 为该工作的共同通讯。研究工作得到了国家自然科学基金, 新疆维吾尔自治区自然科学基金的支持。

紫外非线性光学晶体由于是固态激光器的核心部分, 因此, 被广泛应用于激光技术、光学通讯、光学数据存储和光信号处理等方面。目前, 该领域的关键突破点在于紫外、深紫外波段材料的研制和应用。磷酸盐因其包含刚性结构 PO_4 而使该类材料在紫外、深紫外区无吸收, 在透过范围上具有很大的优势, 是近几年研究的热点。然而, 磷酸盐结构中 PO_4 功能基团的微观二阶倍频系数非常小, 导致该类材料倍频系数及双折射率普遍较小, 如何通过功能基元的合理设计, 既保证磷酸盐紫外透过, 又能有效增大其倍频效应及双折射率, 是目前面临的重要挑战。

该团队在前期磷酸盐光电功能晶体材料研究的基础上, 设计引入具有非线性活性的基元, 即第六周期具有 $6s^2$ 孤电子对的 Pb^{2+} 和 Bi^{3+} , 相对第四、五周期具有孤电子对的离子而言, 这种离子在增大倍频及双折射率的同时, 对紫外波段的透过影响较小。在这种思路的引导下, 成功设计合成了两种紫外波段的非线性光学晶体材料 $\text{Rb}_3\text{PbBi}(\text{P}_2\text{O}_7)_2$ 和 $\text{Cs}_3\text{PbBi}(\text{P}_2\text{O}_7)_2$, 其中, $\text{Rb}_3\text{PbBi}(\text{P}_2\text{O}_7)_2$ 同时具备了磷酸盐难以达到的多种优良综合性能的有效平衡, 倍频效应为 2.8 倍 KH_2PO_4 , 双折射率为 $0.031@1064\text{ nm}$ 和 $0.037@532\text{ nm}$, 紫外截至边为 285 nm , 大的双折射率使得该材料实现了在 1064 nm 下相位匹配。研究者利用第一性原理对该材料的光学性质的来源作了理论分析, 大双折射率主要来自于 P-O 和 Bi-O 基团, 强的倍频效应主要来源于 $[\text{PbP}_2\text{O}_9]_\infty$ 层中类似“蜂窝”状五边形的平行排布。这一工作为后期设计具有优异综合性能的磷酸盐非线性光学晶体材料提供了新的研究思路和技术指导。后期将通过优化晶体生长工艺进一步评估其作为新型紫外非线性光学晶体材料的应用前景。

目前, 陈兆慧研究员团队在磷酸盐领域的研究取得了阶段性成果, 前期的相关工作分别发表在 *Inorganic Chemistry*, *Crystal Growth & Design*, *Journal of Alloys Compounds*, *European Journal of Inorganic Chemistry* 等学术期刊上。



$\text{Rb}_3\text{PbBi}(\text{P}_2\text{O}_7)_2$ 实现了非线性效应、双折射率及截至边三者的有效平

文章链接为: <https://doi.org/10.1002/ange.202007494>