

Supplementary Information

Novel Laser Crystal Lu_2TeO_6 : Crystal Growth, Thermal Properties, and Spectral Analysis

Tingting Cao, Feifei Guo^{}, Fuai Hu, Xutang Tao, Zeliang Gao^{*}*

State Key Laboratory of Crystal Materials and school of Crystal Materials, Shandong
University, Jinan, 250100, China

Email: gaozeliang@sdu.edu.cn (Zeliang Gao)

Email: guofeifei@mail.sdu.edu.cn (Feifei Guo)

1. Supplementary figures

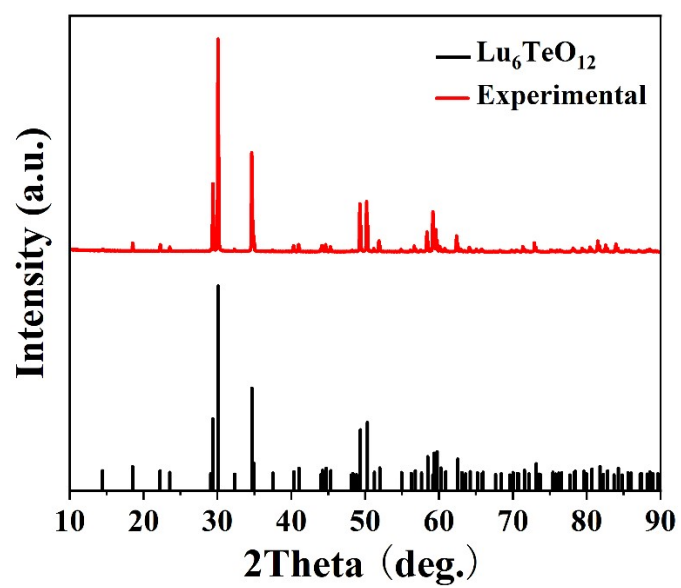


Figure S1 PXRD of the solid residue after the TG-DSC measurement.

2. Supplementary tables

Table S1 The elemental contents of Nd: Lu₂TeO₆ crystal determined by XRF.

no.	Element	Weight percentage (%)	Molar percentage (%)
1	Lu	71.21	64.47
2	Te	28.52	35.24
3	Nd	0.27	0.29

Table S2 Crystal data and structure refinement for Lu₂TeO₆.

empirical formula	Lu ₂ TeO ₆
formula weight (g·mol ⁻¹)	573.54
temperature (K)	296.15
crystal system	trigonal
space group	<i>P321</i> (150)
<i>a</i> (Å)	8.9459(2)
<i>b</i> (Å)	8.9459(2)
<i>c</i> (Å)	5.0618(2)
<i>α</i> , <i>β</i> , <i>γ</i> (deg)	90, 90, 120
volume (Å ³)	350.82(2)
<i>Z</i>	3
ρ_{calc} (g·cm ³)	8.14375
absorption coefficient (mm ⁻¹)	48.020
<i>F</i> (000)	726
crystal size (mm ³)	0.12 × 0.1 × 0.1
radiation	MoK α (λ = 0.71073 Å)
2 θ range for data collection (deg)	5.258–72.596
index ranges	-14 ≤ <i>h</i> ≤ 14, -14 ≤ <i>k</i> ≤ 14, -6 ≤ <i>l</i> ≤ 8
reflections collected	5398
independent reflections	1143 [<i>R</i> _{int} = 0.0560, <i>R</i> _{sigma} = 0.0384]
data/restraints/parameters	1143 / 42/ 44

GOF (F^2)	1.152
final R indexes [$I > 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0359$, $wR_2 = 0.0912$
final R indexes [all data]	$R_1 = 0.0362$, $wR_2 = 0.0917$
largest diff. peak and hole (e $\text{\AA}^{-3}$)	6.83 and -4.53

Table S3 Fractional atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for Lu_2TeO_6 .

Atom	x	y	z	U(eq)
Lu2	0	2839.5(17)	5000	8.2(4)
Lu1	3791.8(18)	3791.8(18)	0	7.8(5)
Te2	0	0	0	7.3(6)
Te1	3333.33	6666.67	4985	6.9(5)
O1	2380(30)	4630(30)	2820(30)	11(3)
O2	1330(30)	5430(30)	7140(30)	9(3)
O3	-1210(30)	800(30)	2120(30)	11(3)

Table S4 Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for Lu_2TeO_6 . The anisotropic displacement factor exponent takes the form: -

$$2\pi^2[h^2a^{*2}U_{11}+2hka^*b^*U_{12}+\dots].$$

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Lu2	8.1(7)	8.9(5)	7.5(6)	-0.39(18)	-0.8(4)	4.1(3)
Lu1	8.1(6)	8.1(6)	6.8(6)	0.01(19)	-0.01(19)	3.7(5)
Te2	7.6(9)	7.6(9)	6.8(13)	0	0	3.8(4)
Te1	6.7(7)	6.7(7)	7.3(9)	0	0	3.4(3)
O1	12(7)	9(6)	8(6)	-2(5)	-1(5)	3(6)
O2	10(6)	10(7)	8(6)	1(5)	2(5)	5(5)
O3	10(7)	13(7)	10(6)	-2(5)	-1(5)	6(6)

Table S5 Bond lengths for Lu_2TeO_6 .

Atom	Atom	Length(Å)	Atom	Atom	Length(Å)
Lu2	Lu11	3.9354(18)	Lu1	O28	2.193(18)
Lu2	Lu12	3.9354(18)	Lu1	O39	2.31(2)
Lu2	Te2	3.5858(11)	Lu1	O310	2.31(2)
Lu2	Te23	3.5858(11)	Te2	O310	1.90(2)
Lu2	Te1	3.2256(9)	Te2	O36	1.90(2)
Lu2	Te14	3.2256(9)	Te2	O3	1.90(2)
Lu2	O1	2.21(2)	Te2	O311	1.90(2)
Lu2	O15	2.21(2)	Te2	O312	1.90(2)
Lu2	O2	2.28(2)	Te2	O39	1.90(2)
Lu2	O25	2.282(19)	Te1	O113	1.922(19)
Lu2	O3	2.16(2)	Te1	O12	1.922(19)
Lu2	O35	2.158(19)	Te1	O1	1.922(19)
Lu1	Te2	3.3921(16)	Te1	O2	1.910(19)
Lu1	O16	2.27(2)	Te1	O213	1.910(19)
Lu1	O1	2.27(2)	Te1	O22	1.910(19)
Lu1	O27	2.193(18)			

(1) +Y-X,1-X,1+Z; (2) +Y-X,1-X, +Z; (3) +X, +Y,1+Z; (4) -1+Y, +X,1-Z;(5) -X, -X+Y,1-Z; (6) +Y, +X, -Z; (7) 1-Y,1+X-Y, -1+Z; (8) 1-Y+X,1-Y,1-Z; (9) +Y-X, -X, +Z; (10) -X, -X+Y, -Z; (11) -Y, +X-Y, +Z; (12) -Y+X, -Y, -Z; (13) 1-Y,1+X-Y, +Z

Table S6 Bond angles for Lu₂TeO₆.

Atom	Atom	Atom	Angle (°)	Atom	Atom	Atom	Angle (°)
Lu11	Lu2	Lu12	80.05(4)	Lu113	Te2	Lu212	69.256(7)
Te23	Lu2	Lu11	95.081(15)	Lu1	Te2	Lu212	135.105(18)
Te2	Lu2	Lu12	95.081(15)	Lu110	Te2	Lu210	69.256(7)
Te23	Lu2	Lu12	175.13(4)	Lu1	Te2	Lu2	69.256(7)
Te2	Lu2	Lu11	175.13(4)	Lu113	Te2	Lu210	135.105(18)
Te2	Lu2	Te23	89.79(4)	Lu1	Te2	Lu210	69.256(7)
Te14	Lu2	Lu12	62.78(4)	Lu110	Te2	Lu212	69.256(7)
Te1	Lu2	Lu12	62.59(4)	Lu110	Te2	Lu113	120
Te14	Lu2	Lu11	62.59(4)	Lu1	Te2	Lu110	120
Te1	Lu2	Lu11	62.78(4)	Lu1	Te2	Lu113	120
Te1	Lu2	Te23	115.22(4)	O39	Te2	Lu2	86.0(6)
Te1	Lu2	Te2	115.01(4)	O38	Te2	Lu2	159.4(6)
Te14	Lu2	Te2	115.22(4)	O3	Te2	Lu212	109.2(6)

Te14	Lu2	Te23	115.01(4)	O313	Te2	Lu2	98.0(6)
Te14	Lu2	Te1	106.38(4)	O3	Te2	Lu2	29.9(6)
O1	Lu2	Lu11	97.8(5)	O38	Te2	Lu212	62.1(6)
O15	Lu2	Lu12	97.8(5)	O313	Te2	Lu210	62.1(6)
O1	Lu2	Lu12	59.7(6)	O39	Te2	Lu212	98.0(6)
O15	Lu2	Lu11	59.7(6)	O310	Te2	Lu210	29.9(6)
O15	Lu2	Te2	121.5(6)	O3	Te2	Lu210	98.0(6)
O1	Lu2	Te23	121.5(6)	O310	Te2	Lu2	62.1(6)
O1	Lu2	Te2	79.6(5)	O314	Te2	Lu210	159.4(6)
O15	Lu2	Te23	79.6(5)	O313	Te2	Lu212	86.0(6)
O1	Lu2	Te1	35.6(5)	O39	Te2	Lu210	109.2(6)
O15	Lu2	Te14	35.6(5)	O314	Te2	Lu2	109.2(6)
O1	Lu2	Te14	121.6(6)	O314	Te2	Lu212	29.9(6)
O15	Lu2	Te1	121.6(6)	O38	Te2	Lu210	86.0(6)
O15	Lu2	O1	152.0(12)	O310	Te2	Lu212	159.4(6)
O1	Lu2	O25	87.5(8)	O3	Te2	Lu1	95.6(6)
O15	Lu2	O25	71.2(6)	O3	Te2	Lu113	40.7(6)
O15	Lu2	O2	87.5(8)	O313	Te2	Lu1	131.3(6)
O1	Lu2	O2	71.2(6)	O310	Te2	Lu110	95.6(6)
O2	Lu2	Lu11	27.8(5)	O313	Te2	Lu110	40.7(6)
O25	Lu2	Lu12	27.8(5)	O310	Te2	Lu1	40.7(6)
O2	Lu2	Lu12	74.1(5)	O3	Te2	Lu110	131.3(6)
O25	Lu2	Lu11	74.1(5)	O38	Te2	Lu113	131.3(6)
O25	Lu2	Te2	101.6(5)	O314	Te2	Lu113	40.7(6)
O2	Lu2	Te23	101.6(5)	O313	Te2	Lu113	95.6(6)
O2	Lu2	Te2	150.5(5)	O314	Te2	Lu1	131.3(6)
O25	Lu2	Te23	150.5(5)	O310	Te2	Lu113	131.3(6)
O2	Lu2	Te14	84.6(5)	O38	Te2	Lu1	95.6(6)
O25	Lu2	Te14	35.7(5)	O38	Te2	Lu110	40.7(6)
O25	Lu2	Te1	84.6(5)	O39	Te2	Lu1	40.7(6)
O2	Lu2	Te1	35.7(5)	O39	Te2	Lu113	95.6(6)
O2	Lu2	O25	81.7(10)	O39	Te2	Lu110	131.3(6)
O3	Lu2	Lu12	91.2(5)	O314	Te2	Lu110	95.6(6)
O35	Lu2	Lu12	152.9(6)	O3	Te2	O313	91.2(8)
O3	Lu2	Lu11	152.9(6)	O314	Te2	O38	91.2(8)
O35	Lu2	Lu11	91.2(5)	O310	Te2	O314	168.7(12)
O35	Lu2	Te23	26.1(6)	O310	Te2	O38	97.4(12)
O3	Lu2	Te23	93.1(5)	O3	Te2	O314	81.3(12)

O3	Lu2	Te2	26.1(6)	O314	Te2	O39	91.2(8)
O35	Lu2	Te2	93.1(5)	O39	Te2	O313	168.7(12)
O35	Lu2	Te1	90.5(6)	O310	Te2	O313	91.2(8)
O35	Lu2	Te14	134.8(5)	O3	Te2	O310	91.2(8)
O3	Lu2	Te1	134.8(5)	O3	Te2	O39	97.4(12)
O3	Lu2	Te14	90.5(6)	O38	Te2	O39	91.2(8)
O3	Lu2	O15	96.7(8)	O38	Te2	O313	81.3(12)
O35	Lu2	O15	99.9(7)	O314	Te2	O313	97.4(12)
O3	Lu2	O1	99.9(7)	O3	Te2	O38	168.7(12)
O35	Lu2	O1	96.7(8)	O310	Te2	O39	81.3(12)
O3	Lu2	O2	165.2(7)	Lu2	Te1	Lu26	120
O35	Lu2	O2	86.2(7)	Lu22	Te1	Lu2	120
O3	Lu2	O25	86.2(7)	Lu22	Te1	Lu26	120
O35	Lu2	O25	165.2(7)	O12	Te1	Lu26	132.7(7)
O3	Lu2	O35	106.9(11)	O1	Te1	Lu2	42.1(6)
Lu26	Lu1	Lu27	80.05(4)	O1	Te1	Lu26	93.9(7)
Te2	Lu1	Lu26	139.98(2)	O1	Te1	Lu22	132.7(7)
Te2	Lu1	Lu27	139.98(2)	O12	Te1	Lu22	42.1(6)
O1	Lu1	Lu26	71.4(5)	O12	Te1	Lu2	93.9(7)
O18	Lu1	Lu26	119.5(5)	O16	Te1	Lu26	42.1(6)
O1	Lu1	Lu27	119.5(5)	O16	Te1	Lu22	93.9(7)
O18	Lu1	Lu27	71.4(5)	O16	Te1	Lu2	132.7(7)
O1	Lu1	Te2	83.5(5)	O12	Te1	O16	90.8(8)
O18	Lu1	Te2	83.5(5)	O16	Te1	O1	90.8(8)
O1	Lu1	O18	167.0(10)	O12	Te1	O1	90.8(8)
O18	Lu1	O39	79.4(7)	O2	Te1	Lu22	90.5(6)
O1	Lu1	O39	89.6(7)	O2	Te1	Lu26	134.8(6)
O18	Lu1	O310	89.6(7)	O26	Te1	Lu22	134.8(6)
O1	Lu1	O310	79.4(7)	O26	Te1	Lu2	90.5(6)
O211	Lu1	Lu27	88.6(5)	O22	Te1	Lu22	44.1(6)
O27	Lu1	Lu27	29.1(5)	O26	Te1	Lu26	44.1(6)
O211	Lu1	Lu26	29.1(5)	O2	Te1	Lu2	44.1(6)
O27	Lu1	Lu26	88.6(5)	O22	Te1	Lu26	90.5(6)
O27	Lu1	Te2	125.9(5)	O22	Te1	Lu2	134.8(6)
O211	Lu1	Te2	125.9(5)	O26	Te1	O12	175.5(9)
O27	Lu1	O18	90.6(7)	O22	Te1	O1	175.5(9)
O211	Lu1	O18	97.1(7)	O26	Te1	O16	86.2(8)
O27	Lu1	O1	97.1(7)	O22	Te1	O12	86.2(8)

O211	Lu1	O1	90.6(7)	O2	Te1	O12	92.5(8)
O211	Lu1	O27	108.1(10)	O2	Te1	O1	86.2(8)
O211	Lu1	O310	93.6(7)	O26	Te1	O1	92.5(8)
O27	Lu1	O310	158.1(7)	O22	Te1	O16	92.5(8)
O27	Lu1	O39	93.6(7)	O2	Te1	O16	175.6(9)
O211	Lu1	O39	158.1(7)	O2	Te1	O26	90.7(8)
O39	Lu1	Lu27	110.3(5)	O22	Te1	O2	90.7(8)
O310	Lu1	Lu27	161.0(5)	O22	Te1	O26	90.7(8)
O39	Lu1	Lu26	161.0(5)	Lu2	O1	Lu1	124.6(9)
O310	Lu1	Lu26	110.3(5)	Te1	O1	Lu2	102.3(8)
O310	Lu1	Te2	32.4(5)	Te1	O1	Lu1	128.0(11)
O39	Lu1	Te2	32.4(5)	Lu11	O2	Lu2	123.1(9)
O39	Lu1	O310	64.9(10)	Te1	O2	Lu2	100.2(7)
Lu2	Te2	Lu210	75.68(3)	Te1	O2	Lu11	134.0(10)
Lu2	Te2	Lu212	138.511(13)	Lu2	O3	Lu113	125.3(10)
Lu212	Te2	Lu210	138.511(13)	Te2	O3	Lu2	124.0(10)
Lu113	Te2	Lu2	69.256(7)	Te2	O3	Lu113	106.9(8)
Lu110	Te2	Lu2	135.105(18)				

(1) +Y-X,1-X,1+Z; (2) +Y-X,1-X, +Z; (3) +X, +Y,1+Z; (4) -1+Y, +X,1-Z;(5) -X, -X+Y,1-Z; (6) 1-Y, 1+X, +Z; (7) 1-Y,1+X-Y, -1+Z; (8) +Y,+X,-Z; (9) -X, -X+Y, -Z; (10) +Y-X, -X, +Z; (11) 1-Y+X, 1-Y, 1-Z; (12) -Y, +X-Y, -1+Z; (13) -Y,+X-Y, +Z; (14) -Y+X, -Y, -Z