



您现在的位置: 首页 > 新闻动态 > 科研进展

福建物构所IR-NLO晶体材料研究获系列进展

更新日期: 2020-06-28

红外二阶非线性光学 (IR-NLO) 晶体材料在资源探测、光电对抗、空间反导、国防通讯等方面有着重要的应用。目前商业化的IR-NLO晶体材料(例如, AgGaQ_2 ($Q=\text{S}, \text{Se}$) 和 ZnGeP_2) 存在多方面的性能缺陷, 限制了它们的应用范围。因此, 设计和合成具有性能优良的新型IR-NLO晶体材料仍是该领域的研究热点和难点。

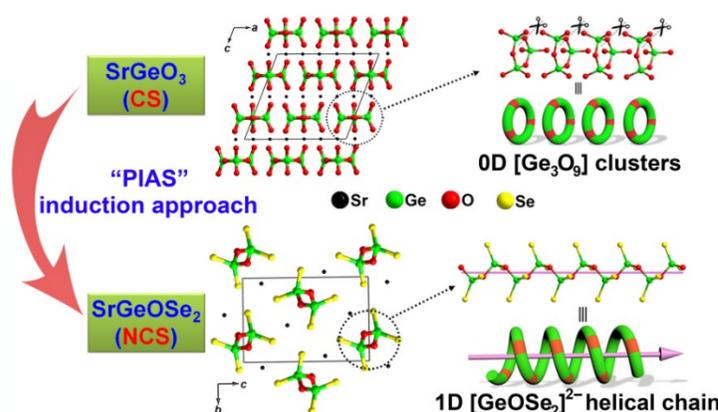


图1利用局部等价阴离子取代策略实现从中心(SrGeO_3)到非心(SrGeOSe_2)的晶体结构转变。

如何合理地设计合成非心结构是获得IR-NLO晶体材料的前提条件。针对这个挑战性的课题, 中科院福建物构所结构化学国家重点实验室朱起龙和林华团队在国家自然科学基金和海西研究院“春苗”人才专项等项目资助下, 创新性地采用局部等价阴离子取代 (Partial Isovalent Anion Substitution) 的结构设计策略, 成功实现从中心(SrGeO_3)到非心(SrGeOSe_2)的晶体结构转变(图1)。测试结果表明, 化合物 SrGeOSe_2 属于I-型相位匹配, 且具有适中的粉末倍频响应 ($\text{SHG} = 1.3 \times \text{AgGaS}_2$) 和高的激光损伤阈值 ($\text{LIDT} = 36 \times \text{AgGaS}_2$)。此外, 理论计算的分析结果表明该化合物的倍频效应主要来自于由不对称单元 $[\text{GeO}_2\text{Se}_2]$ 所构筑的一维 $[\text{GeOSe}_2]^{2-}$ 螺旋链。相关研究结果已发表在美国化学会*Chem. Mater.* 杂志 (*Chem. Mater.* 2020, DOI: 10.1021/acs.chemmater.0c02011), 该论文第一作者为联合培养在读硕士生冉茂银。

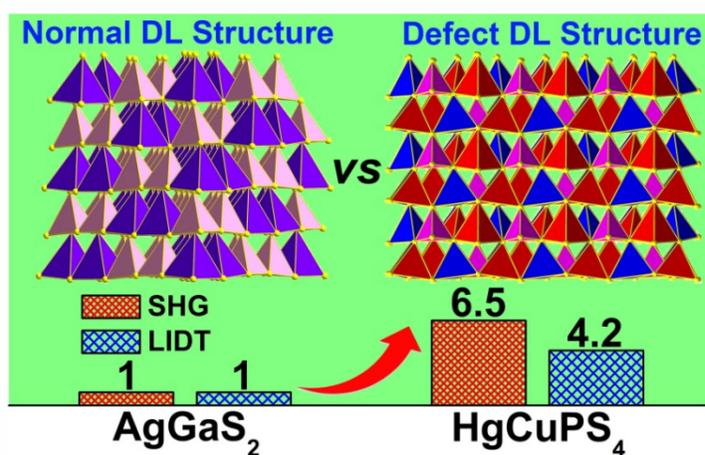


图2综合性能优异的IR-NLO晶体材料 HgCuPS_4 。

该课题组还提出利用具有高极化能力的 Hg^{2+} 来构建具有类金刚石网格 (DLF) 硫属化合物的策略, 采用高温固相技术成功地发现了一例含汞的四元硫化物 HgCuPS_4 。该化合物的显著结构特征是由非对称结构基元通过共享顶点同向排列形成三维缺陷的DLF。独特的缺陷DLF和强极化率的 Hg^{2+} 离子互相结合, 使得该化合物在较宽的IR范围内能够实现相位匹配, 同时具备高的激光损伤阈值 ($\text{LIDT} = 4.2 \times \text{AgGaS}_2$) 和强的粉末倍频效应 ($\text{SHG} = 6.5 \times \text{AgGaS}_2$), 这是迄今为止报道的四元DLF硫属化合物的最大值(图2)。此外, 详细的理论计算结果表明, HgCuPS_4 的强的SHG源于畸变的 $[\text{HgS}_4]$ 、 $[\text{CuS}_4]$ 和 $[\text{PS}_4]$ 非对称结构基元的协同效应, 即三维缺陷DLF结构。这一发现可以

