



您现在的位置: 首页 > 新闻动态 > 科研进展

福建物构所NLO材料电子结构与功能基元获得最新进展

更新日期: 2021-11-02

红外非线性光学 (NLO) 晶体材料在诸多领域具有重要的应用, 如激光雷达、激光通讯、红外遥测、光电对抗等。目前商用的红外 NLO 晶体材料有硫 (磷) 属化合物 AgGaS_2 、 AgGaSe_2 、 ZnGeP_2 等, 该类材料具有强的 NLO 效应, 但存在一些本征问题, 如低的激光损伤阈值 (LIDT), 非相位匹配, 多声子吸收等, 而不能用于高功率的激光输出。特别是 NLO 效应主要来自于化合物的共价键, LIDT 主要来源于材料的离子键, 由于共价键和离子键在化合物中存在矛盾, 因此特别是兼具强的 NLO 效应和高的 LIDT 的材料成为目前红外 NLO 晶体探索中急需解决的问题。

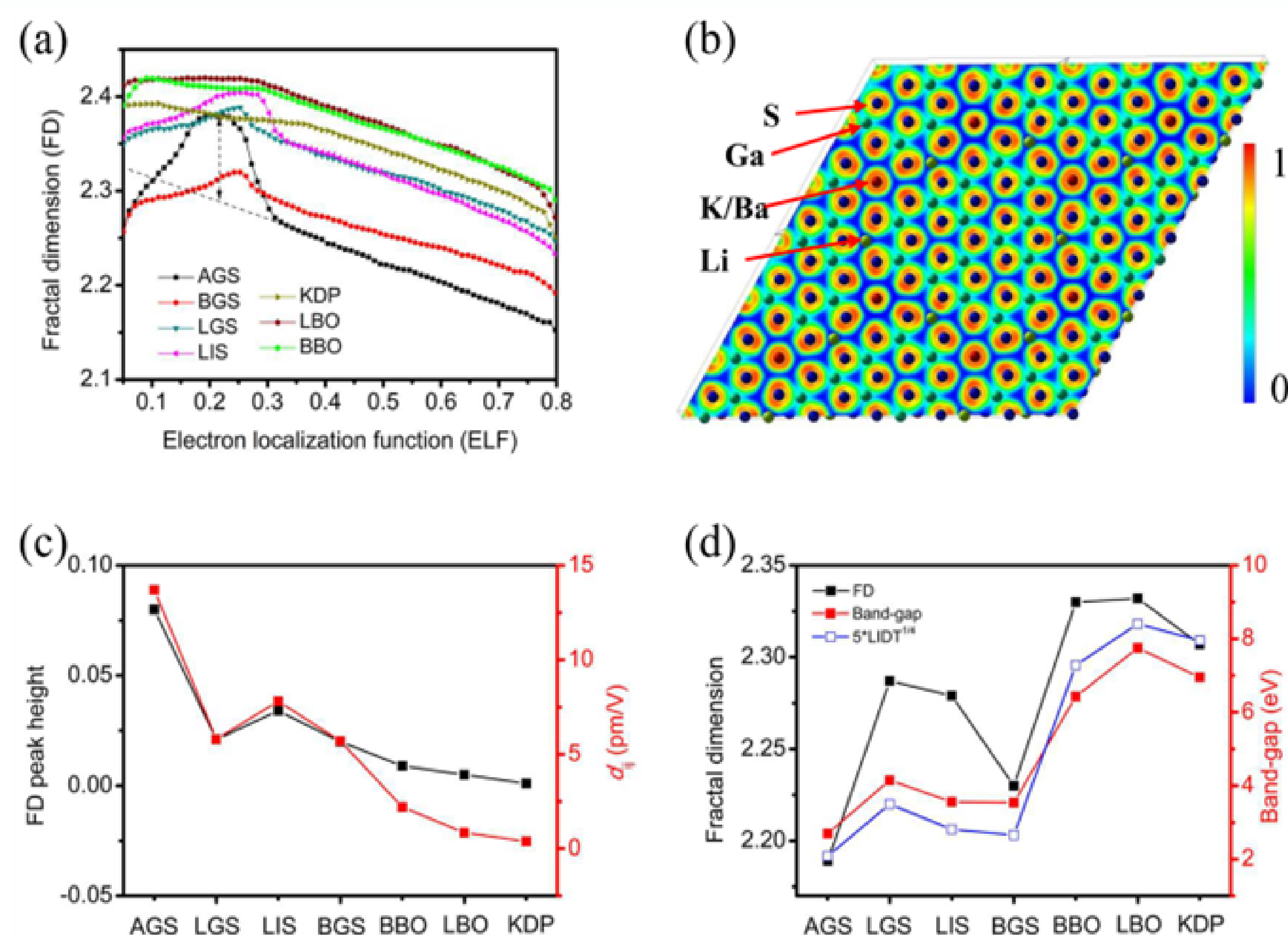


图: 电子局域函数的分数维度与NLO效应和LIDT的唯象规律

在国家自然科学基金重大科研仪器研制、创新研究群体等项目的资助下, 福建物构所结构化学国家重点实验室郭国聪研究员领导的研究团队, 通过理论计算电子局域函数的分数维度并找出该电子结构拓扑量与NLO效应和LIDT的唯象规律, 发现共价性和离子性功能基元相互穿插较为均匀的晶体结构有利于获得兼具强NLO效应和高LIDT的红外NLO材料。同时在实验上成功合成出具有上述结构特征的系列化合物 $\text{A}_2\text{Ba}_6\text{Li}_3\text{Ga}_{28}\text{S}_{49}$ ($\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$), 这些化合物具有强的倍频 (SHG) 信号 ($1.9\text{-}2.1 \times \text{AgGaS}_2$ @1064 nm; $0.5\text{-}0.6 \times \text{AgGaS}_2$ @1910 nm)、高的激光损伤阈值 ($16.7\text{-}18.0 \times \text{AgGaS}_2$)、宽的红外透过范围 (0.4-25.0 μm) 及满足相位匹配, 是潜在的红外NLO晶体材料。相关工作以《Balanced Infrared Nonlinear Optical Performance Achieved by Modulating Covalency and Ionicity Distributions in Electron Localization Function Map》为题, 发表在 *Mater. Horiz.* **2021**, DOI: 10.1039/d1mh01434j, 刘彬文副研究员为该论文第一作者, 姜小明副研究员和郭国聪研究员为通讯作者。

此前, 该研究团队在材料功能基元研究及其指导高性能NLO材料设计方面取得了一些重要进展 (*Angew.* **2021**, *60*, 11799; *Chem. Mater.* **2021**, *33*, 3729; *JACS* **2020**, *142*, 10461; *Angew.* **2020**, *59*, 4856; *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2020**, *12*, 53950; *CCS Chem*, **2020**, *2*, 946; *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 5700; *Adv. Optical Mater.* **2018**, 1800156; *Chem. Mater.* **2017**, *29*, 9200; *Chem. Mater.* **2017**, *29*, 1796; *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 6273; *Chem. Mater.* **2015**, *27*, 8189)。

文章链接: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2021/mh/d1mh01434j>

(郭国聪课题组供稿)

