



您所在的位置: 首页» 资讯» 学术动态» [成果] 化学学院吴立明、陈玲课题组在《德国应用化学》杂志发表“结构匹配度调控策略实现商用AGS材料

的重要研究成果

[成果] 化学学院吴立明、陈玲课题组在《德国应用化学》杂志发表“结构匹配度调控策略实现商用AGS材料性能大幅提升”的重要研究成果

文章来源: 化学学院 编辑: 滕非 | 2019-05-22 518 次



北京师范大学宣传片

红外 (IR) 非线性光学材料 (NLO) 虽在长距离激光通讯、红外对抗、光通讯及光电设备等领域得到了广泛应用, 但由于其数量匮乏, 不能满足日益增长的应用需求。目前只有三个商用材料, 分别是 AgGaS_2 (AGS), AgGaSe_2 和 ZnGeP_2 , 其中AGS性能最优, 品质因子最大; 但该材料带隙较小 (2.58 eV), 激光损伤阈值低, 器件寿命短。因此如何提升AGS的激光损伤阈值和综合性能是该领域的一个难点和热点, 具有重要的科学意义和应用价值。

为提升AGS的带隙和激光损伤阈值, 前人尝试通过等电荷, 不含d电子的Li代替Ag, 获得了 LiGaS_2 化合物。的确LGS带隙明显比AGS大, 且激光损伤阈值有大幅提升。然而, 由于两者半径的差异, LiGaS_2 晶体结构从AGS的四方高对称性降低到了正交的低对称性结构, 这使得LGS的二阶非线性系数大大降低 ($\text{LGS-d}_{36} = 5.8 \text{ pm V}^{-1}$ vs $\text{AGS-d}_{36} = 15.9 \text{ pm V}^{-1}$)。

近日北京师范大学化学学院吴立明课题组、陈玲课题组首次通过部分Li取代Ag的方案合成得到了一系列化合物 $\text{Li}_x\text{Ag}_{1-x}\text{GaS}_2$ ($0 < x < 1.0$), 通过单晶数据的精确分析, 他们发现Li掺杂化合物能在很大的组分范围内 (0-0.6) 保持AGS四方晶体结构高对称性, 这打破了长期以来的常规认识。对保持高对称性结构中Li最大掺杂比例材料 $\text{Li}_{0.60}\text{Ag}_{0.40}\text{GaS}_2$ 的研究表明, 该材料透过截止边达到365 nm (比AGS的截止边缩短了180 nm)、大幅拓宽了AGS材料的应用波段范围; 同时其激光损伤阈值得到大幅提升, 达AGS的8.60倍。

进一步研究意外地发现 $\text{Li}_{0.60}\text{Ag}_{0.40}\text{GaS}_2$ 体系倍频效应强度能达到AGS的1.10倍。通过深入结构分析和第一性原理研究表明, Li离子对Ag离子的取代一方面能优化费米能级周围的能带结构, 增大了材料带隙; 同时, Li原子的引入有效地降低了AGS结构中密堆积硫原子的失配度 (最大降低了30%)。由于位错的不断减小使得 $\text{Li}_x\text{Ag}_{1-x}\text{GaS}_2$ 结构更接近高对称性的ZnS型结构。由于结构匹配度的提升, $\text{Li}_{0.60}\text{Ag}_{0.40}\text{GaS}_2$ 中阴离子基团间协调性增强, 最终导致化合物的二阶非线性光学系数增大。该研究首次实现商用非线性光学材料AGS材料二阶倍频系数和激光损伤阈值的同步增长, 具有重要的意义, 同时对其他相关材料体系的研发也有重要的启示作用。

该工作近期被《德国应用化学》杂志Angewandte Chemie International Edition接收(Angew. Chem. Int. Ed. 10.1002/anie.201903976; Angew. Chem. 10.1002/ange.201903976), (影响因子: 12.102) 并入选VIP文章 (仅有5%的文章入选), 被评价为“the work made a significant contribution to the improvement of IR NLO material field.” 该研究被Angewandte Chemie旗下x-mol作为亮点推介。

北京师范大学化学学院作为唯一单位。化学学院硕士生周慧敏为论文第一作者, 化学学院博士生熊琳, 作为第二作者。本研究申请发明专利一项201910127231.1, 发明人: 吴立明, 周慧敏, 陈玲; 专利权人: 北京师范大学。



京师书韵 (图书馆印象)

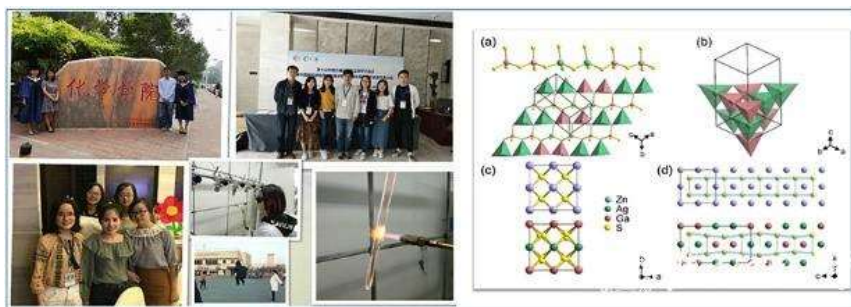
09 北京师范大学2
2019.12 论坛举行

09 北师大心理学部
2019.12 斩获2019年全

09 2019年京津冀
2019.12 作交流会议在

09 周作宇参加化
2019.12 牢记使命”主题

09 [研讨]2019年
2019.12 动力流动与教



1 教育学科服务
研讨会暨北京师
2019-12-0

2 [论坛]《亚洲
会议暨2019亚
2019-12-0

3 “展望未来—
合作发布会”暨
2019-12-0

4 北京师范大学科
2019-12-0

5 广东省国强公
赠设立凉山教
2019-12-0