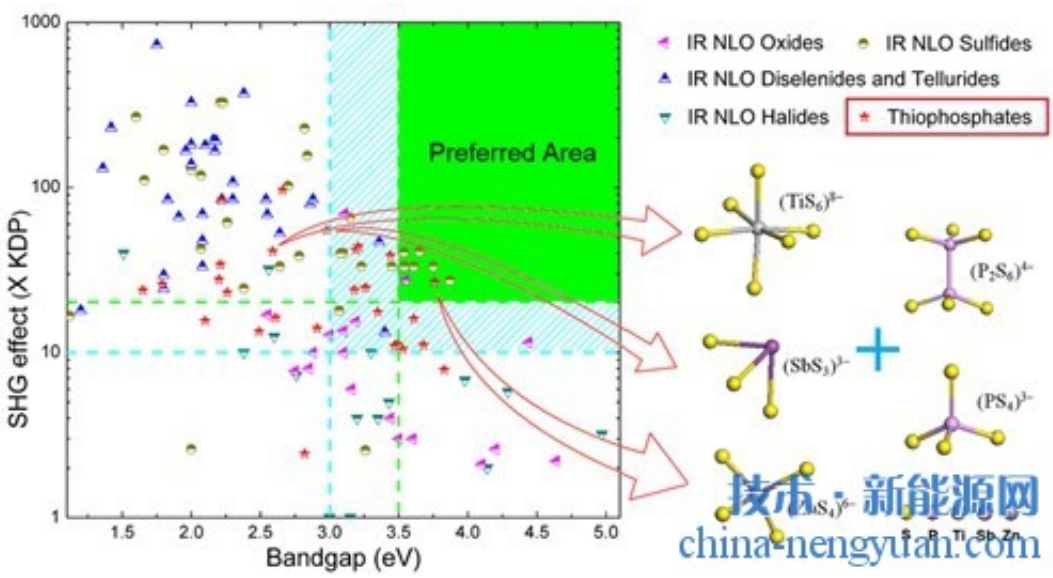
理化所中红外激光变频材料研究获进展



近日，美国化学学会会刊（J. Am. Chem. Soc. 2015, DOI: 10.1021/jacs.5b07920）以Metal Thiophosphates with Good Mid-Infrared Nonlinear Optical Performances: A First-Principles Prediction and Analysis
为题，发表了中国科学院理化技术研究所功能材料与激光技术院重点实验室晶体中心林哲帅课题组的研究工作。

中红外（波长2-8μm）激光变频材料在化学、信息、生物、远程通讯和光电对抗等领域具有非常重要的应用，但目前已发现的材料还难以满足工业和商业的需求。通过高通量研究平台，可以极大地提高这些光电功能材料的研发效率和降低研发成本，获得具有自主知识产权的优秀材料。

为了实现从单一目标的计算材料学向“材料基因工程”的转变，林哲帅课题组从原子结构和化学组分出发，对亟待发展的中红外激光变频材料进行大规模计算模拟，进而深入理解其结构、组分和性能之间的“构效关系”，他们基于系统的第一性原理计算研究首次提出目前还没有引起关注的金属硫磷（P-S）化物将是一个具有潜在优异性能的中红外非线性光学体系。

优质的中红外激光变频材料，需要达到激光变频效应（倍频系数dij）和抗激光损伤阈值（对应带隙Eg）的平衡，即位于下图的绿色区域（Eg > 3.5 eV, dij > 20 × KDP）。迄今为止，大部分已发现的材料都无法达到此要求。课题组研究人员首次系统地搜索了所有具有无心结构的M-N-P-S型金属-硫磷化物（M为碱金属碱土金属阳离子；N为中心配位阳离子），他们按照材料的微观基团配位环境将此化合物体系分成四类，分别包含孤立的P-S基团、二阶姜泰勒效应的阳离子、孤对电子效应的阳离子以及短半径低配位的阳离子等。经过对这些“材料基因”信息的预测和分析，他们揭示具有孤立硫磷基团的体系的光学各项异性不能满足中红外变频的要求；而具有二阶姜泰勒效应和孤对电子效应的体系带隙较低（Eg< 3 eV），也难以实现Eg和dij的平衡。与之对比，具有短半径低配位阳离子的体系，可以呈现Eg和dij很好的平衡（位于图中的绿色区域），能够较好地满足优秀中红外非线性光学晶体的性能条件。

与理化所研究员姚吉勇合作进行的实验合成和光学测试也证实了第一性原理预测和计算的结果。该工作为优秀中红外非线性光学材料的探索提供了结构选型参考标准，对于丰富这一重要的光电功能材料的探索和设计思路具有重要作用。

相关研究工作得到了国家自然科学基金委、科技部“863”计划的大力支持。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/84166.html