新疆理化所在新材料预测设计中取得进展(INORGANIC CHEMISTRY,SCI影响因子:4.700)

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/2019.html

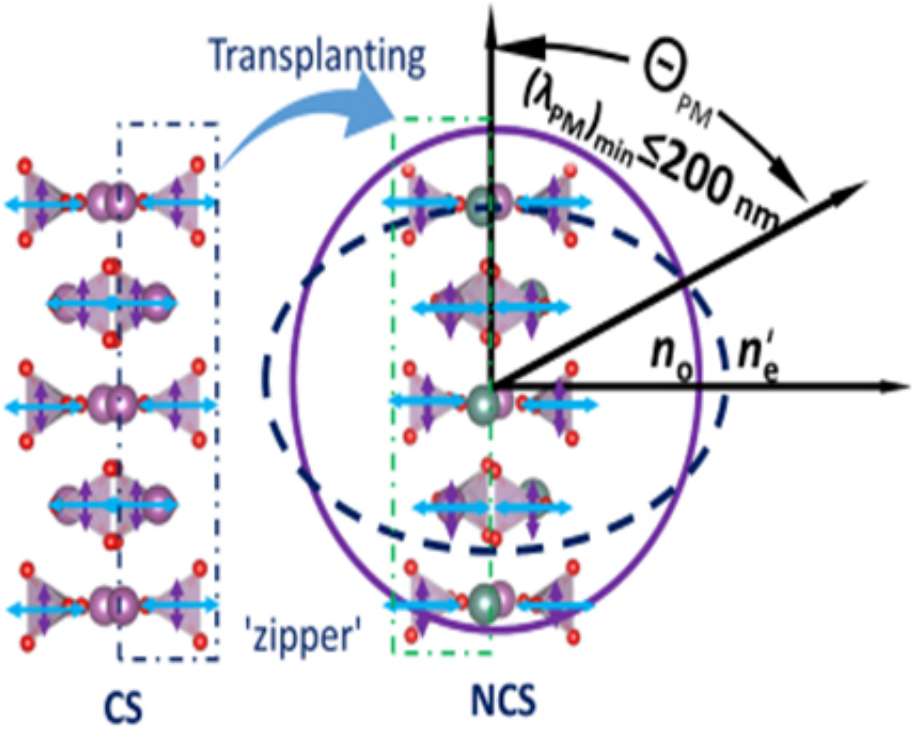
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

在化学合成与设计中，潜在结构的多样性是探索新化合物、功能材料的基础，但对于靶向设计具有特定性能的功能材料来说却是一个巨大的挑战。然而，随着科技的发展，高性能集群的计算能力得到了大幅提升。这使得从庞大的数据库中筛选出性能优良的功能材料——高通量筛选、从第一性原理出发搜索全局势能最低结构——晶体结构预测、通过学习已有的结构特点创造出新结构等这些新型的探索材料的方法成为可能。中国科学院新疆理化技术研究所新型光电功能材料实验室潘世烈团队自2011年开始进行材料软件研发、材料设计、第一性原理计算和预测研究，为新材料制备提供方向。

最近几年，该研究团队在晶体结构预测及理性设计功能材料方面取得了一定的进展。研究工作者首次引入全局能量最低结构搜寻方法实现了红外非线性光学材料和紫外非线性光学材料的结构预测。在红外非线性光学材料中，在满足光学应用要求前提下提高激光损伤阈值是关键所在，研究工作者首次引入全局能量最低结构搜寻方法在Na-Ga-S体系中搜寻性能优异的红外非线性光学材料。结构表明，I-42d空间群的NaGaS2不仅具有与商业化材料AgGaS2相当的非线性光学系数，而且具有在红外非线性光学材料中最高的热导率，因而有利于高激光损伤阈值。因此，NaGaS2有效地提高了激光损伤阈值和避免了因双光子吸收产生的热效应。上述成果已发表在美国化学学会期刊《无机化学》(INORGANIC CHEMISTRY,SCI影响因子:4.700)(Inorg. Chem.2018，DOI: 10.1021/acs.inorgchem.8b01174)上。在紫外非线性光学材料中，设计满足深紫外非线性光学材料要求并且能输出相干深紫外光是一个具有挑战性的课题。研究工作者在Na-Be-B-O体系中搜寻常压下稳定结构发现在势能最低的四个相中，P-6相的NaBeBO3具有优秀的非线性光学性质。深紫外截止边可达171 nm，倍频效应与商业标准KDP(KH2PO4)的相当，且相位匹配可到深紫外区;上述成果发表在《科学报告》(Scientific Reports,SCI影响因子:4.122)上(Sci. Rep.2016, 6, 34839)。进一步，该团队通过引入氟元素加大带隙蓝移紫外截止边，还可使电子非对称分布有利于非线性光学性能的提高，丰富结构有利于增加非心化合物的发现几率。基于以上特点，在Be-B-O-F体系中在常压下搜寻到了性能优异的深紫外非线性光学材料γ-Be2BO3F，其深紫外截止边低至138 nm，倍频效为1.8倍KDP，深紫外相位匹配波长达到了152 nm，成为深紫外区具有潜在应用的非线性光学晶体;相关成果发表在美国化学学会期刊《无机化学》上(Inorg. Chem.2018, 57, 5716)。

最近，该团队在理性设计方面取得突破，拓展了新材料预测方法。该方法是通过深入研究结构性能关系，挖掘出控制相关性能响应的功能模块，进而进行模块设计组装预测新材料。四面体基元是用于设计深紫外非线性光学材料的基本组成单元，但由于在倍频响应与光学各向异性响应的不确定性，材料科学家们并没有重视其在深紫外非线性光学材料的应用。为了探索四面体的光学各向异性响应机制，研究工作者们提出了评估四面体光学各向异性方法并发现由于共价相互作用较

强的稀土阳离子引起的四面体角度偏离有利于四面体基元的光学各向异性。这一部分工作已发表在英国皇家化学学会期刊《化学通讯》上(Chem. Commun., 2017, 53, 2818)。在进一步的研究中，科研工作者们通过系统研究四面体化合物的预测光学各向异性并找到了控制四面体基元化合物光学各向异性的功能模块——具有“ zipper ”排列且存在角度偏离的四面体基元。在不破坏功能模块的基础之上以稀土元素作为调节晶体结构对称性及光学各向异性在磷酸盐中设计了一系列深紫外非线性光学材料。这些材料的双折射相比于之前非心四面体化合物有了明显的提升并具有深紫外截止边。其中α-YSc(PO4)2是到目前为止第一例达到了深紫外非线性光学材料初步评估要求的磷酸盐。该纯理论设计工作发表在国际学术期刊《美国化学会志》上(J. Am. Chem. Soc.2018, 140, 10726)。



图：从中心化合中移植功能模块到非心化合物中设计新型深紫外非线性光学晶体

新疆理化所在新材料预测设计中取得进展(INORGANIC CHEMISTRY,SCI影响因子:4.700)

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发