新疆理化所在建立多级筛选系统实现海量数据筛选高热导率非线性光学材料方面取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/22478.html

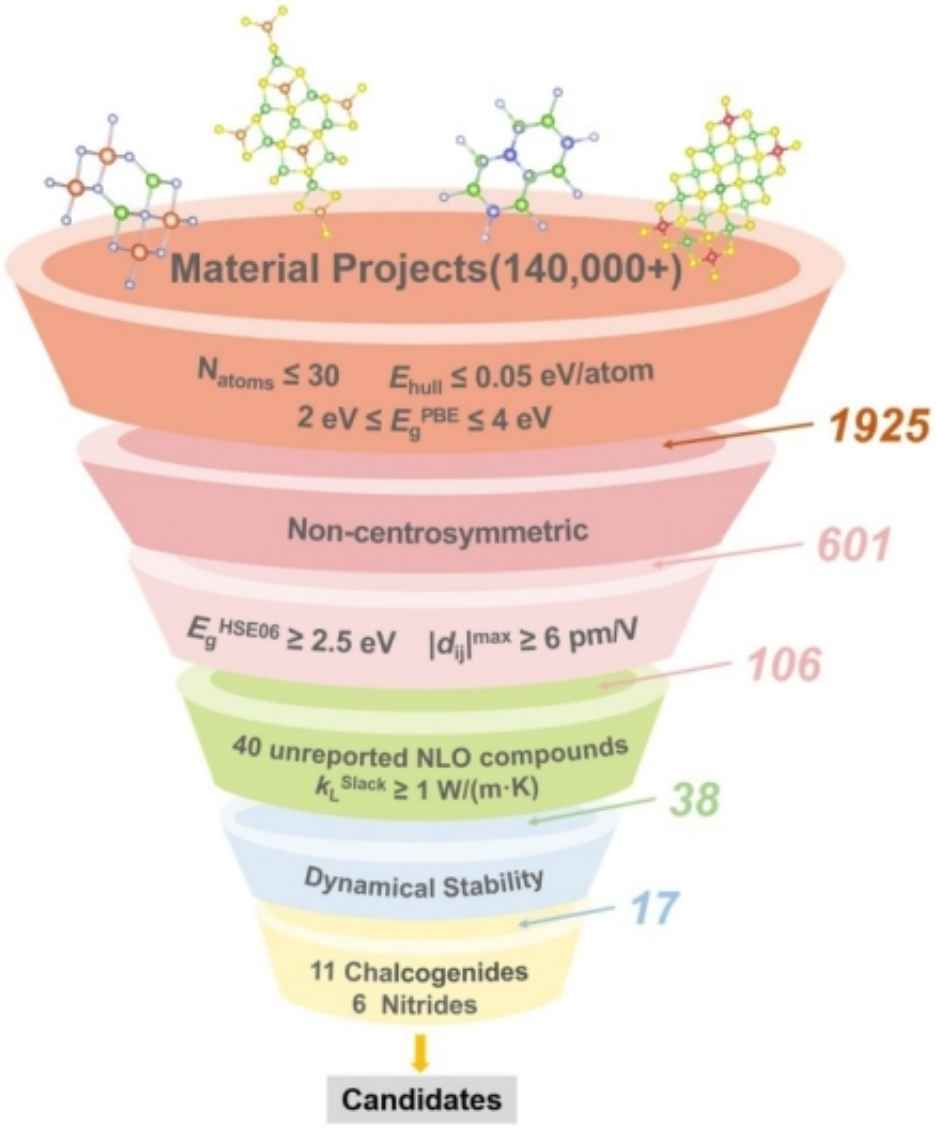
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

新疆理
化所在建立多
级筛选系统实现海量数据筛
选高热导率非线性光学材料方面取得进展

$_2$和$AgGaSe_2$
因在红外区域的传输范围宽、非线性光学响应大等原因成为首选材料，但它们的抗激光损伤阈值较低，阻碍了其高功率应用。宽带隙和高热导率是提升抗激光损伤阈值的关键，然而，随着带隙增大，非线性光学响应和热导率均有下降的趋势，寻找具有高热导率的非线性光学晶体颇具挑战性。随着计算技术的发展，基于第一性原理的高通量筛选已成为加速新材料发现的重要方法，而针对非线性光学材料的筛选通常应用于特定的硫化物或硼酸盐体系，缺少对于更广泛的化学空间的探索。此外，筛选或设计条件集中在大非线性光学系数和宽带隙上，而热导率因计算资源的限制而较难评估，在高通量筛选中往往被忽视。

近日，中国科学院新疆理化技术研究所晶体材料研究中心报道了一种无偏高通量筛选方法，用于具有高热导率的非线性光学材料。该研究首次在非线性光学领域实现了热导率的高通量计算，并将热导率属性纳入非线性光学晶体的高通量筛选评估体系。研究通过高效、多级的高通量筛选方法，从数据库Material Project的140000多种材料中，筛选得到17种具有高热导率的非线性光学候选材料。它们均具有良
好的光学性能：大的非线性光学响应（0.5-2.9×$AgGaS_2$）、宽带隙（2.59-4.09
eV）。研究还对筛选得到的化合物Sr_2SnS_4
进行实验合成，测试了其非线性光学响应，验证了筛选的有效性。详细的结构-性能分析揭示了氮化物与硫属化合物在非线性光学活性基元和热导率等方面的不同。该研究提出的高通量筛选方法为搜索具有高热导率的非线性光学材料提供了强大的工具。

相关研究成果发表在《德国应用化学》上。研究工作得到国家自然科学基金和中科院等的支持。



靶向高通量筛选的工作流程

研究团队单位：新疆理化技术研究所

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