
理化所发展出中红外非线性光学材料筛选新策略

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25474.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！

中红外非线性光学晶体能够通过频率转换产生中红外可调谐激光，在环保、医疗等方面应用广泛。目前，主要的商用红外非线性光学晶体有硫镓银、硒镓银和磷锗锌等，但存在激光损伤阈值较低的缺陷，难以满足更丰富的实际需求。因此，亟需探索抗激光损伤性能更优异的中红外非线性光学材料。由于热损伤是激光损伤的重要组成部分，具有大热导率的非线性光学材料可能具备高的激光损伤阈值。然而，在非线性光学材料的研究中，热导率数据的准确获取较为困难，材料的热输运性能长期被忽视。因此，以较低代价获得对材料热导率的准确预测，对于评估中红外非线性光学材料的抗激光损伤性能，以及实现倍频效应、激光损伤阈值、双折射率以及红外透过范围之间的平衡具有重要意义。

近日，中国科学院理化技术研究所林哲帅团队发展了基于机器学习的中红外非线性光学材料筛选新策略，并利用该方法在硫属化合物这一中红外非线性光学材料的常见候选体系中筛选出若干种潜在的具有平衡的热输运和光学性能的中红外非线性光学材料。研究结合低精度的热导率半经验方法计算数据和高精度的实验测量数据，利用迁移学习（Transfer Learning, TL）手段，建立了基于晶体图神经网络（Crystal Graph Convolutional Neural Network, CGCNN

）算法的晶格热导率回归预测模型，在测试集上获得了与半经验计算方法相当的预测精度，减少了粗略评估晶格热输运性能所需的计算资源和时间。研究对Materials Project数据库收录的6000

78种材料（其中39

种被

报道为非

线性光学材料）。

研究通过进一步对未报道的材料进行

第一性原理计算发现，2

种兼具

大倍频效应、

高晶格热导率、宽带隙和适

宜双折射率的潜在中红外非线性光学材料 Li_2SiS_3 和 AlZnGaS_4

被筛选出，同时第一性原理计算获得的高晶格热导率数值与机器学习预测值相接近，证实了预测工具的可靠性。

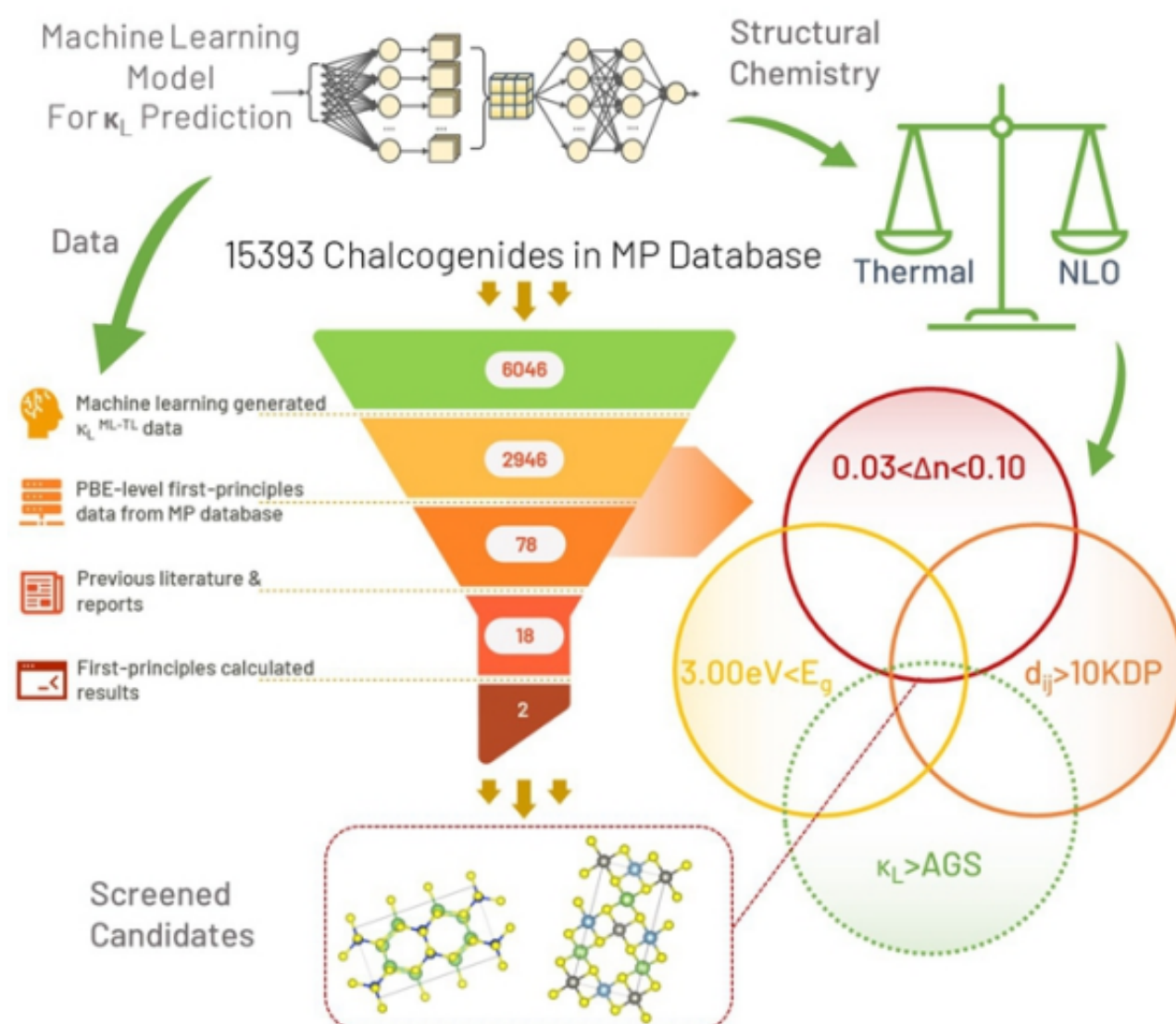
研究进而对机器学习模型产生的晶格热导率数据、文献报道的非线性光学性能数据进行数据分析

，发现硫属化合物中由4配位基团组成，其中心阳离子键价和为+2~+3且来自IIIA、IVA、VA和IIB族元素的材料，如类金刚石硫属化合物，是具有大的倍频系数和热导率的中红外非线性光学材料的有力候选者。

本工作将机器学习与第一性原理计算、高通量筛选相结合，提出了一套中红外非线性光学材料性能预测和筛选的完整工作流程，揭示了产生大的热导率和倍频系数的结构化学规律。该研究不仅为非线性光学晶体的筛选提供了有效策略，而且为寻找具有平衡的非线性光学性能和抗激光损伤性能的晶体提供了可解释的研究方向。

相关研究成果以A Machine Learning Study on High Thermal Conductivity Assisted to Discover Chalcogenides with Balanced Infrared Nonlinear Optical Performance为题，发表在《先进材料》(Advanced Materials)上。研究工作得到国家自然科学基金的支持。

论文链接



中红外非线性光学材料机器学习辅助的筛选策略

研究团队单位：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](http://www.iikx.com)转发