



面向世界科技前沿，面向国家重大需求，面向国民经济主战场，率先实现科学
国家创新人才高地，率先建成国家高水平科技智库，率先建设国际一流科研研

[首页](#) [组织机构](#) [科学研究](#) [成果转化](#) [人才教育](#) [学部与院士](#) [科学普及](#) [党建与科学](#)

[首页](#) > [科研进展](#)

压力诱发的反常有序-无序相变研究获进展

2020-05-21 来源：物理研究所

【字体：大 中 小】



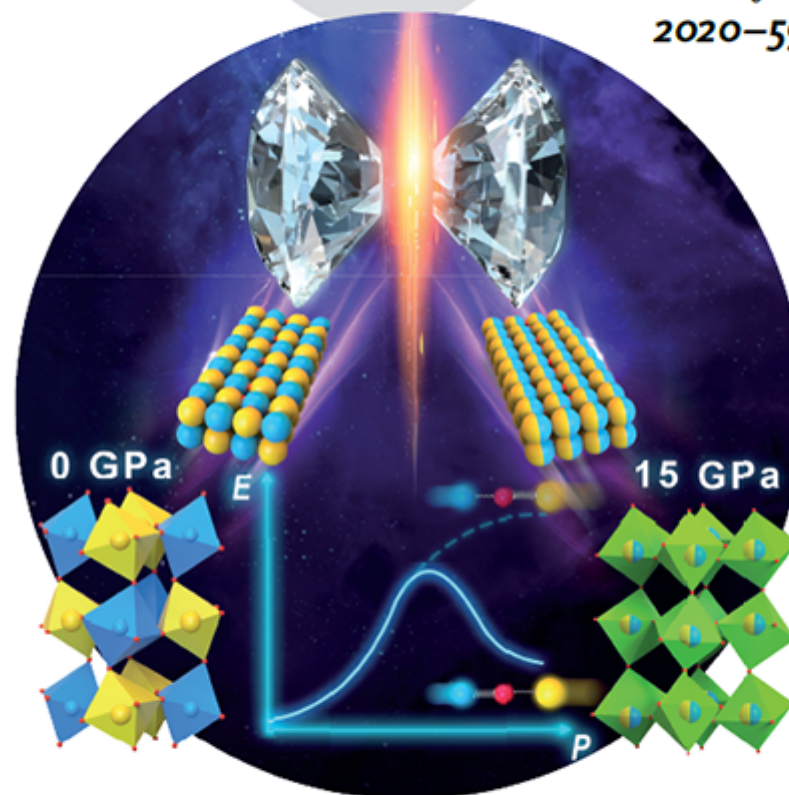
高压是研制具备特殊性能新材料的重要技术手段，高压能够合成许多在常规条件无法形成的新结构，并在常压下以亚稳相存在。高压在比如天体内部就处于高压状态，研究压力有关的物质态是认识自然界实体物质的重要前提。钙钛矿结构是功能材料的重要结构载体，也是地幔物质的主要结构形态，对高压科学具有特殊意义。中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心极端条件实验室靳常青团队长期从事的高压研制，通过高压技术创新，设计并研制发现了多种含有钙钛矿结构基元的功能新材料(*Nature* 375, 301(1995), *PNAS* 105, 7115(2008), *PNAS* 116, 12156 (2019))。

有序-无序转变一直是材料科学的前沿和难点，材料中原子有序度可以直接决定晶体结构、稳定性、磁性、热导、电导、弹性模量等性能有着极为重要的影响。人们通常利用温度和组分调控材料的有序度，作为独立于温度、组分的热力学变量，压力对材料有序-无序转变的作用

近期，靳常青团队在高压合成的B位双钙钛矿结构功能材料研究上取得新进展。对于已知的大部分材料，压力将增加结构配位数，并且无序化。B位双钙钛矿 ($A_2B'B''O_6$) 中B位由同比例的两种离子 ($B'B''$) 填充，前人在双钙钛矿材料中仅有压力增加B位有序度的报道，对于此无序化会增加晶胞体积，使得无序结构在高压下无法稳定存在。靳常青团队副研究员邓正与博士李文敏、赵建发运用高压技术成功研制了B位材料 Y_2CoIrO_6 ，首次发现合成压力导致的B位无序化相变。通过尝试不同合成压力条件，他们发现随着合成压力上升，双钙钛矿新材料 Y_2CoIrO_6 现为低压有序、中压部分有序、直至15GPa(1GPa ~1万大气压)完全无序。出现无序的压力恰好相当于上地幔和下地幔的边界，这个边界是地壳和地幔的分水岭，下地幔充满钙钛矿结构的矿物。同时，有序向无序转变引发了材料的磁性由长程亚铁磁性演化为短程类自旋玻璃态。他们发现诱导无序化现象的主要原因是：B位两种离子化学键强度（即轨道杂化的程度）在高压条件形成独特组合形态，导致无序结构拥有较小的晶胞体积，得到了热力学模型和理论计算的支持。

相关研究成果发表在近期的《德国应用化学》上 (*Angewandte Chemie-International* 59, 8240(2020))，入选热点和封面论文，封面标题为“这种与化学直觉相反的现象促使人们重新认识固态科学中的压力效应”。该研究工作获得美国Rutgers大学教授Greenblatt、Kotliar、Wang等多个团队的密切合作。该工作得到科技部 (2018YFA03057001, 2017YFB0405703)、国家自然科学基金委 (11921004, 118201010) 和中科院青促会 (2020007) 等的支持。

[文章链接](#)



Chemical intuition ...

... tells us that pressure increases ordering in most known materials. The discovery of pressure-induced disorder in the double perovskites Y_2CoIrO_6 and Y_2CoRuO_6 , which is reported by Z. Deng, C.-J. Kang, C. Jin, M. Greenblatt, and co-workers in their Research Article on page 8240, is in contrast to traditional theories of order-disorder mechanisms and calls for reconsideration of pressure effects in solid state sciences.

WILEY-VCH

图1 本工作被选为 *Angewandte Chemie* 封面文章

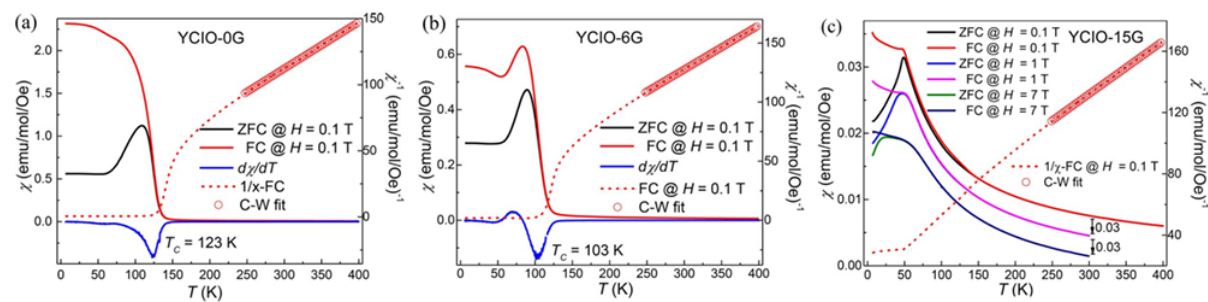


图2 不同压力合成的 Y_2CoIrO_6 钙钛矿结构，由于B位离子有序度的显著差别，诱发了迥异的磁性

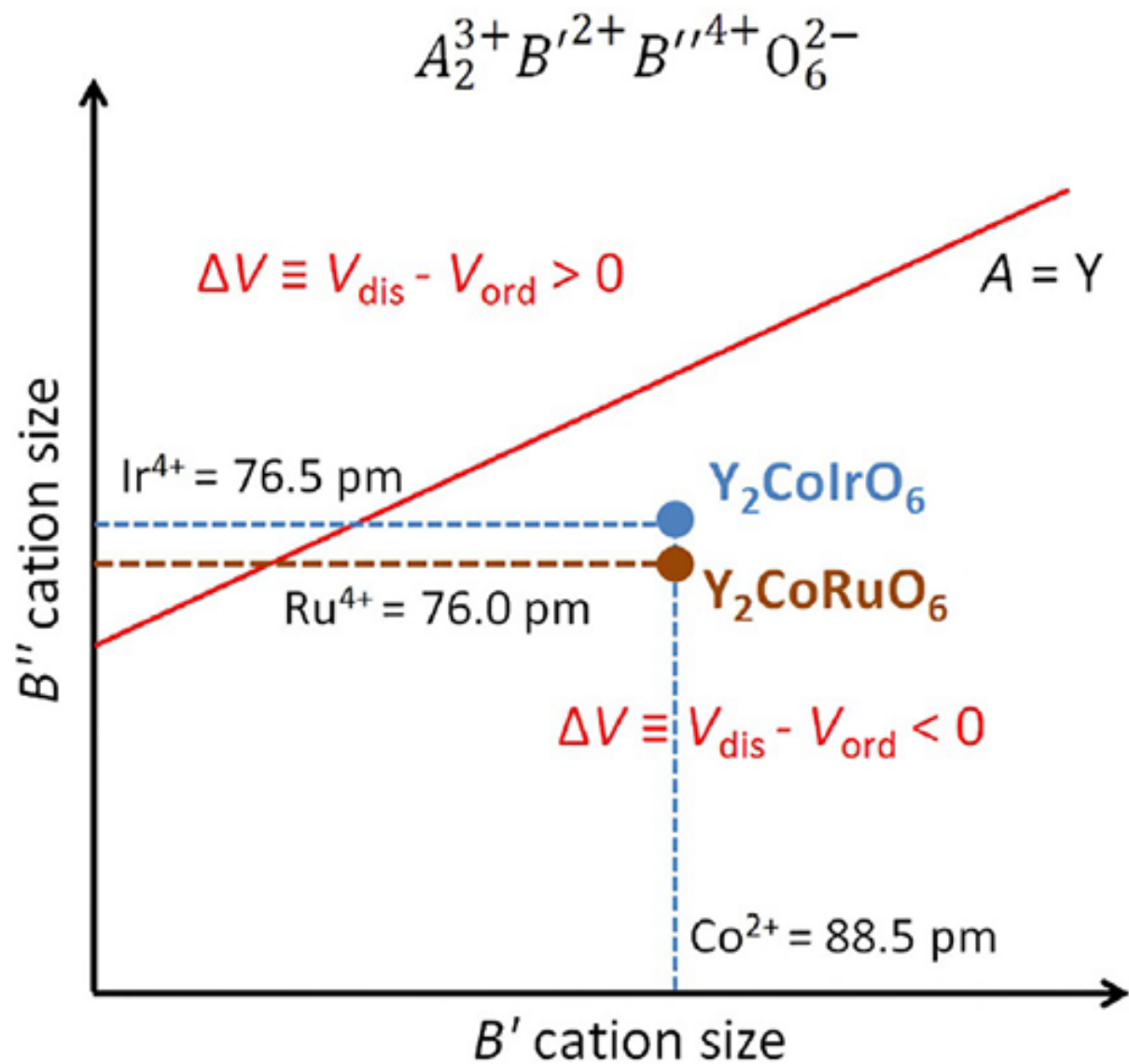


图3 双钙钛矿的有序-无序相图， Y_2CoIrO_6 位于压力诱导无序的区域中



- » 上一篇：营养与健康所等发现乳腺癌肿瘤干细胞调控新机制
- » 下一篇：理化所低温高精度微波谐振测频研究取得进展



扫

© 1996 - 2020 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号

地址：北京市三里河路52号 邮编：100864

电话：86 10 68597114（总机） 86 10 68597289（值班室）

编辑部邮箱：casweb@cashq.ac.cn

