

第二十二届中国高压科学学术会议 摘要集

主办单位:中国物理学会高压物理专业委员会 承办单位:宁波大学物理科学与技术学院 | 高压物理科学研究院 协办单位:中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室

2025年6月6-9日 中国·宁波

专题 A: 高压下的物质结构及性质
Structure studies under high-pressure conditions using synchrotron XRD technique: Typical
superconducting materials and their phase diagrams 刘浩喆
纳米孪晶金刚石的协同硬化/韧化机理 全柯
高压下有机-无机杂化配位化合物的结构演化和物性研究 蔡伟照
极端条件下含能材料的结构相变与分解反应研究 代如成4
超硬材料的理论设计与实验合成 高国英
高温高压下钝感含能材料在高温水中的性质研究 都婵6
基于羰基有机小分子的高压光学性质研究 李龙
高压下光电功能材料的物性调控 李全军
硬且特别导电的铜硼化合物 周向锋
金刚石材料:显微结构工程、界面与相变 徐波
高压技术—从认知深化到实践拓展 维慧阳11
高压下富氢化合物的结构及超导性质研究 段德芳
低维功能晶体材料的设计及压力调控 陈旭
In ₂ Te ₅ 中非晶相变增强的超导电性 赵毅
高压下物质的介电性质研究 韩永昊15
氢 IV 相的 X 射线单晶衍射研究及对氢金属化过程的启示 吉诚
金刚石的高压研究及压力标定 李冰
新型光功能材料的压致构效调控及响应机理研究 李茜
High-Pressure Non-Equilibrium structures and Physical Properties 林传龙
压力对 Co ₃ TeO ₆ 结构和带隙的调控研究 柳雷
高压驱动材料设计:结构和性能关系的定量解析 吕旭杰
金属卤化物中声子调控激发态动力学的高压光谱研究 隋来志
Progress in approaching room temperature superconductivity in hydrides Viktor Struzhkin23
Pb/MnSe ₈ Te ₁₋₈ 中高压相的光导-超导耦合机理与截获研究 王培
高压下硅酸盐熔体的弹性波速、密度及状态方程 许满
微结构材料力学性质的时空分辨布里渊散射光谱成像技术研究 杨廷强26
High-Pressure Studies of Graphene Nanodevices and 2D Magnetic Materials using Advanced
Quantum Sensing and Transport Techniques 张增明
Pressure-Driven Electronic and Structural Transitions in Emerging Optoelectronic Materials Saqib
Rahman ····································
B-IN-П 化百初甲双氢键的尚压切九 介/ 于 ··································
中丁取别妍九彻灰尚压下的同域结构与汉书性质 祭전群
针对 CENIC2 尿丁位直与初性住向压下演化的研先 与钢明

目 录

Time and Temperature as Internal Pressure Parameters for Tailoring the Magnetic Functional
Properties of Manganites Nikita Liedienov
高压下碱/碱土金属硼化物的结构设计及物性研究 刘云仙
准二维卤化物钙钛矿在高压下的结构和光电性能研究 张华芳
钒酸铋纳米片的高压结构相变 程本源
高压下 p/π 电子调控诱导的反常压致发光响应 翟春光
压力诱导的 2H-Fe _{0.33} TaS ₂ 结构相变和磁塌缩 金诚
层状磷材料在高压下结构演化的层数依赖性 李辰恺
高压下金属氧族化合物的理论研究 李非
压力调控 CH ₃ NH ₃ PbBr ₃ 钙钛矿量子点中的双激子发射 李海宁40
高压下镝的结构相变研究 李宏凯
$CuInP_2S_6$ 全温区结构和铁电性能研究 李一凡
高压下硫族代磷酸盐的高压金属化相变 李玉强43
原位 SAXS 研究高静水压对牛奶的微观结构影响 刘广峰44
单斜相 Cr5Te8 中反常霍尔效应的压力调控 刘净宜45
二维 Janus 材料 RhSeCl 在高压下的结构和非线性光学性能 刘克凤46
Pressure-induced phase transitions and decompositions of Sr-S compounds 刘勇
范德华反铁磁材料(Fe1-xCox)5CoTe2中压力诱导层间滑移 牛群48
高压下半结晶聚合物 PEEK 光学带隙演化及结构调控机制 史冰倩49
压力对多铁性氧化物 Ni ₃ TeO ₆ 结构和带隙的调控研究 苏琪琦
CL-20 基主客体炸药的高压制备和结构稳定性研究 孙晓宇
高压下电子结构诱导锂液-液相变研究 童群超52
高温高压处理实现高熵合金强塑性协同提高 王超
动态压缩下多场耦合力致发光响应 王毫
Tuning Bandgaps and Correlations in Graphene Moir éSuperlattices with High Pressure 王宇鹏57
高压下零维锑基金属卤化物的压力诱导发光增强研究 吴金斐
一维之字形共边钙钛矿($C_6H_{10}N_2$)PbX ₄ (X = Br, Cl)的压力诱导激发相关发射颜色调谐与增强
吴学仟
高温高压下过渡金属硅化物和氮化物陶瓷的制备、性能与应用研究 肖成香60
Thickness Dependence of Optical and Electronic Properties of FeCl ₂ Films under High Pressure
闫志鹏61
压力诱导液态氢化锂的结构转变及热力性质的异常 颜小珍62
压力诱导下 CrO2 的结构转变和磁性变化 姚安东
成分对压力诱导高熵合金多形性转变的影响 张飞
高压下手性 HgS 的螺旋结构转变与伴生的超导转变 张赫
高熵硼化物高压下熔点的计算预测 张衡中
高压下金属卤素钙钛矿的光电性质调控 张龙

超越泡利极限的颗粒状 Ta-Te 超导纳米线 赵凌霄
SrZn ₂ S ₂ O:Mn ²⁺ 在快速压缩下的振荡力致发光与动态响应机制 赵婷婷
压力诱导的等对称性二级相变的机制 钟启发
高压下具有超导和超离子态的锂铋化合物 周佩
金刚石对顶砧中多环芳烃的高压单晶 X 射线衍射研究 周文居
ANOMALOUS EXCITON BEHAVIOUR IN 2D BLACK PHOSPHORUS UNDER PRESSURE
陆阳73
高压下硫化硒的相变及电学性质研究 胡蕙昕
锑的不相称结构中由成键极性引起的链失序 赵博浩
压力诱导 SHG 新纪录 曲佳76
Cu单晶冲击结构演化的分子动力学模拟研究 安思敏
少层 2H-NbSe2 的高压拉曼光谱研究 吴海玲
压力调控紫精 MOPs 电子转移路径的压致变色研究 王贺冲80
高压室温压制法制备透明纳米羟基磷灰石生物陶瓷 胡开平
高压调控与 CuS 掺杂协同提升 p 型 SnSe 晶体热电性能 胡开平
液化气体的冲击压缩:分子解离及样品/氟化锂界面处的辐射变化 MUHAMMAD SABEEH
<i>AKRAM</i>
通过静水压对黄铜矿 AgXTe ₂ (X = In, Ga)的热电性能进行双向优化 郭思琦84
Pressure-Induced Spin Transition in Two-Dimensional Hoffman-Type Coordination Spin Crossover
Compounds 柴瑞轲 ······85
基于压力带工程的非对称金属接触 MoS2 的增强和极性可切换光响应 陈淑欣86
复杂体系新能源材料的结构探索 董洪亮
低维铅基金属卤化物的压力诱导发光增强研究 房媛媛
二维层状半导体 CrPS4 中光电效应巨幅增强的压力定制相工程 冯俊铭
氮化铝陶瓷的制备、表征和应用 龚发
高压下无铅双钙钛矿 Cs ₂ AgInCl ₆ 的结构和光电性能研究 郭宏伟
两种叠氮化物的高温高压相变及其稳定性研究 郭旭
压强下 WSe ₂ 光电性能的调控 姜懿峰
KZn _{1-x} Mn _x (PO ₃) ³ 荧光材料的晶体结构调控及高压发光特性 蒋佳月
基于超快压缩的 Grüneisen 参数测量及物态方程研究 孔君
氨水合物的高压相变研究 李芳菲
ReS2光电特性的压力调控研究 李明璇97
自旋交叉化合物的压卡效应研究 李瑞鑫
压力增强二维金属磷硫族化合物半导体 SnPSe3 的光电性能 李世新
压力增强二维金属磷硫族化合物半导体 SnPSe3 的光电性能 李世新
压力增强二维金属磷硫族化合物半导体 SnPSe3 的光电性能 李世新

高压下 InSe 光电性能研究 林月103
镧系元素钬压力下的振动特性研究 刘沛源
The Negative Change of the Spin Transition Temperature and Increase of the Hysteresis Width under
Pressure 马楠
Structural and Magnetic Properties of Multiferroic Composite 年級楠
层状磷硫族化合物在高压下的物性研究 乔倩
High pressure and high temperature modulation of electrical conductivity in high hardness silicon
nitride-carbon composites 乔乔108
掺入 B ₄ C 的高熵 (Ti _{0.2} Zr _{0.2} Hf _{0.2} Nb _{0.2} Ta _{0.2})C 陶瓷韧性的增强
Tuning Wide Room Temperature Hysteresis in Novel Fe(II) Spin-Crossover Complexes 苏丹阳 …110
具有分子间电荷转移特性的 Pe-4F2CN 晶体的高压研究 孙驰原
基于相变工程的三维阳离子卤化铅杂化材料中自陷激子发射增强 孙雪宁112
High-pressure stoichiometric evolution of the As-H system: Dimerization and decomposition
王邵杰113
CrFeNiAl _x (x=0、0.1、0.3) 高熵合金在高压下的相变研究 王宇双114
高温高压烧结 TaSi2 的微观结构和物理性能研究 王志坤
高压下二维金属卤素钙钛矿的激子工程:深蓝光发射增强与光电流响应调制 魏林116
高压下非铅双钙钛矿 Cs ₂ TeCl ₆ 的光电性质调控研究 吴姝颖
基于非常规发光有机小分子材料的发射增强 武敏
压痕下单晶硅具有取向依赖性的相变 杨虹宇
(Ti _{0.2} Zr _{0.2} Nb _{0.2} Hf _{0.2} Ta _{0.2})C的高温高压合成及其物性研究题目 杨烁
插层与高压协同策略实现 Mo ₂ S ₃ 超导电性 于林超
二硼化铬的高压合成、力学性能和磁性 张浩
高压下锰基金属卤化物(TMS)2MnBr4的结构及光电性质的研究 张鹏
范德华层状半导体 SnPSe3中的压力诱导超导性 赵春燕
The force-electric coupling effect of single-walled carbon nanotubes under extreme conditions 赵鹏程
单晶 Si 的孪晶调控 赵松126
NaAlSi ₂ O ₆ 在高温高压下的相变研究 陈政洁
Pressure-induced structural transition of pyrochlore Tm2Sn2O7 张富清
Structural stability and equations of states of lanthanum up to 337 GPa 李明豫129
专题 B: 高压下新材料的合成及物性
碳化铬与立方氮化硼在高压下的弹性力学性质研究 房雷鸣
超轻质高强单相铝基复杂成分合金 曾桥石131
新型 5d 锇基钙钛矿的高压合成及其奇异磁性研究 陈洁
高压稳定新型稀磁半导体(Ba, K)(Zn, Mn) ₂ As ₂ 的高居里温度 邓正
基于亲铁性的 5d 贵金属氮化物高压合成方法 雷 力

高温高压下三元金属碳氮化物的合成研究 梁阿坤
高温高压条件下金刚石内部缺陷调控 刘晓兵
高温高压技术在热电材料领域中的应用暨 N 型高温氧化物热电陶瓷的高压制备与性能优化
马红安
增强型钛酸铅基负热膨胀新材料的设计、高压制备与机理研究 潘昭
氮基高能量密度材料的研究 王贤龙
压致双态转换材料与器件 王永刚
非晶氧化硼晶界增强的高强度、高弹塑性氮化硼复合陶瓷 武英举
新型全过渡金属高阶有序钙钛矿氧化物的高压制备和物性研究 王潇
纳米结构下的高压相截获过程 肖天元143
物质模拟软件 ARES 及其在极端条件下材料设计应用 谢禹
Synthesis, structural stability, sound velocities, thermoelasticity, and strength of novel high-entropy
alloys at high P-T conditions 邹永涛145
几种磁电量子功能材料的高压制备与物性研究 龙有文
离子层状结构基元数据库的构建及其在功能材料设计中的应用 邓俊
N18 环: 一种可以跨维度构筑新型聚合氮结构的基本结构单元 高玉香
偏应力诱导的自陷态激子发光转化 吕超凡
重费米子材料 Ce3CrAs5 的高压合成及物性研究 闭保森
Uniaxiality-Induced Reduced-Pressure Synthesis of Ultrahard Paracrystalline Diamond 潘越151
高温高压合成和烧结耐高温高强度碳化锆陶瓷材料 彭放
在后尖晶石氧化物中发现压缩的 CuO ₆ 八面体及奇异的自旋结构 皮茂材
高压下微观结构设计对热电材料性能的调控 孙海瑞
A、B 位同时有序的四重钙钛矿半金属 LaCu ₃ Ni ₂ Re ₂ O ₁₂ ——高压制备与物性研究 唐帅156
典型层状化合物在高温高压下的热电输运研究 王殿振
B-C-N 晶体的制备与性能研究 徐保银158
高压高温合成准一维半导体材料 TiSe3 于振海
Shock synthesis of BiFeO3 and its ferroelectric property 张福平
新型 N ₄ 链聚合氮结构的高压合成和常压截获 张慧敏
大体积高压设备在研制新型功能材料中的应用 张俊
高压下 N2-O2 合金的拉曼光谱研究 赵欣雨
高压下层状三卤化物的合成与表征 周密
极端高压下的纳米碳材料研究 陈亚彬
Controlled Synthesis of Two-dimensional Diamond under Extreme Conditions Jiayin Li166
高压合成具有极化结构的氮化物钙钛矿 CeTaN ₃ 及其铁电性能研究 宋国柱167
Interfacial Bonding of Diamond/BN hetrostructure under extreme conditions 白露168
高温高压下 SnS 的高热电性能 高语崎
高压锻造烧结制备高性能 TiB2 陶瓷 霍浪浪

新型非晶碳-金刚石复合材料的合成与表征 李晨明	·····171
高压快速制备立方 GeSe 基热电材料 李航	·····172
晶界工程调控超硬纳米聚晶金刚石的合成 李相君	173
大尺寸超硬非晶碳的合成 李旭	·····174
基于亲铁性的 5d 贵金属氮化物高压合成方法 刘德璞	·····175
Carbon Vacancy Induced Metallicity and Lattice Distortion for Superior Mechanical Prope	rties in
Niobium Carbide 庞宇跃	·····176
高压合成 GeTe 热电材料及其物性研究 沈涛	·····177
镧系金属三氢化物高压相的截获 施柯羽	·····178
Effect of High Pressure on the Ferroelectric Properties of New Multiferroic Materials 常者	家蕊
	·····179
高压高温合成富硼 VB2复合材料的断裂韧性提升 宋德鑫	180
铁氮化物: 高压合成、氮无序与局域磁矩 陶雨	181
Pressure generation under deformation in a large-volume press 王赛赛	182
高压下三元 A15-(Lu,Y) ₄ H ₂₃ 的合成与超导电性 张可欣	183
镱的氢化物的高压合成与超导研究 张思佳	184
cBN-Si ₃ N ₄ 复合材料的高温高压制备及其性能研究 张松朋	185
六方金刚石的合成研究 陈德斯	186
内嵌金属富勒烯的高压结构转变与电输运性质研究 尹思	·····187
专题 C: 高压下的超导与强关联体系	188
氢基高温超导体的理论设计与实验合成 高国英	188
高压下多元氢化物高温超导体的实验研究 黄晓丽	190
超高压极端条件下高温超导体的探索 孔盼盼	191
系列锰基化合物中压力诱导/增强的超导电性 李庆	192
高压下氢基超导体的实验探索 刘广韬	193
高压下双层和三层 RP 相镍氧化物的非常规超导电性理论研究 路洪艳	194
高压铋基富氢化合物高温超导体的实验研究 马良	195
Pressure-induced strange metal phase in a metallic kagome ferromagnet 次斌	196
高压下重镧系金属的强关联效应 宋静	197
高压下单质钛和硫的超导电性以及新奇电输运行为 王洪波	198
La ₃ Ni ₂ O ₇ 超导电性的电子轨道依赖研究 吴为	199
新型锂基/铝基电子化合物超导材料的理论设计 张守涛	200
高压下氢基超导体的理论设计 钟鑫	201
非笼型氢化物高温超导体的理论设计 崔文文	202
磁性半导体 Eu(Te, Se)2的高压输运和结构研究 王铂森	203
Interplay of superconductivity and charge-density-wave in kagome metal CsV3Sb5 under p	ressure
路欣	204

Pr4Ni3O10单晶的压力诱导超导及电子结构研究 裴翠颖
Phases and Phase transitions in pressurized SrCu ₂ (BO ₃) ₂ 郭静
压力诱导的层状材料 RbMgBi 超导电性与电子结构重构 陈文轩
Pressure-Induced Superconducting Phases and Electronic Reconstruction in Layered RbMgBi
Xintian Chen
Substitution of Y, Ce, and Th for La in $LaBeH_8$ as a path towards lower synthesis pressures of
superconducting hydrides 马原
利用高压超快光谱揭示 La ₃ Ni ₂ O ₇ 中类密度波相的演化 孟养浩
Sn ₄ P ₃ 中大的负面压缩效应和超导电性增强行为 王 琦
CuTe 中压力诱导的电荷密度波态与各向异性超导电性 王舒阳
基于 NV 色心的镍氧化物高压超导研究 文俊彦
压力诱导的类 CDW 转变 应剑俊
静水压诱导的 Bi2Se3拓扑超导及应用拓展 郑群飞
Pressure tuning of superconductivity in natural bulk van der Waals heterostructure 周永惠216
中熵合金 TaNbHfZr 的穹顶型超导和创纪录超导温度 吴李昀虓
基于金刚石 NV 色心的高压超导磁探测 陈吴昊
高压下的 ZrP2:声子软化-硬化转变附近的超导电性 陈绪亮
黑磷体系超导物态压力及层数依赖及演变 程文静
笼目超导体 CsV ₃ Sb ₅ 中超导配对对称性随压力的演化 冯旭阳
超导 A15 型 La ₄ H ₂₃ 中的反常金属态 郭鉴宁
镍氧化物高温超导体 La ₃ Ni ₂ O ₇ 的超高压演化 李婧嫄
层状交变磁体 La2O3Mn2Se2中压力驱动自旋交叉诱导的异常面内晶格塌缩 柔一康224
高压下铋掺杂 122 型铁基超导体 BaFe ₂ (As _{1-x} Bi _x) ₂ 的超导特性演化 刘影
压力驱动 6R-TaS2 中的双穹顶超导以及超导再入 吕心邓
铁磁材料 CeAgGa 在高压下的电阻行为 沈晓玲
非笼型氢化物 LaB ₂ H ₈ 的合成和超导性质研究 宋晓旭
高压下多层碲烯中的双超导穹顶 田灿229
Ta2NiSe5 激子绝缘相的高压超快光谱研究 王晓伟
Kagome 单晶 Lu ₂ Ti ₆ B ₉ 中压力诱导超导电性 王泽蔚231
高压下锰基化合物 MnB4 中超导电性的发现 项浙宁
Zintl 相化合物 6R-CaGe2 在高压下的结构相变及超导电性 徐昆博
高压调控转角双层石墨烯体系反常霍尔效应 叶春晖
镍氧化物 Pr₄Ni ₃ O _{10-δ} 压力下的超导特性的发现 张恒源
Pressure-modulated electrical properties in twisted bilayer grapheme 张天颂
高压下 Ti _{1-x} Mn _x 合金中观测到高达 26 K 的超导电性 张英杰
压力诱导的穹顶状超导性与非常规电荷密度波相变 张雨晴
高压热处理温度参数对 La _{0.65} Ca _{0.25} Ba _{0.1} MnO ₃ 磁性与磁热效应的影响研究 张颖239

Hydrogen-Vacancy-Induced Stable Superconducting Niobium Hydride at High Pressure 马尔	专恒
	241
专题 D: 高压理论与计算	··242
超离子冰的多场耦合相变和声子谱研究 董校	242
压力诱导的新颖结构及其超导特性 李延龄	243
B-C-O 化合物硬质相的结构设计与性能研究 刘超	244
基于 CPU 并行的超高速撞击过程中产生的等离子体模拟 宋卫东	245
压力作用下铁的氧化还原转变以及金属元素的压致非金属化 王晓丽	246
基于双屏蔽模型修正的强关联材料宽压域物性模拟 王越超	247
高压下富氮材料的结构设计及性质研究 姚震	248
高压下的碳材料的设计 朱升财	249
Superconductivity above 90 K at ambient pressure in Cs intercalated C_{24} fullerene Cs_3C_{24} 高淼	··250
复相图与超临界现象 叶麒俊	251
金属镁的多相物态方程模拟与建模研究 咸家伟	252
高压聚合材料结构与能量特性的理论与实验研究 李楠	253
神经网络正则变换 王磊	254
机器学习预测 Hubbard U 值在 FauGen 软件中的实现 王贤龙	255
ABACUS: 一个面向大体系的高效电子结构计算工具 任新国	256
Synergistic effects of pressure and carrier injection on structural phase transition of semicondu	ictors
魏苏淮	257
极端条件下物质元素分离的原子尺度研究 陈博	258
动态压缩下液态水的超快结冰 邓昶昊	259
High pressure superconductivity in La-based ternary hydrides <i>Ijaz-Shahid</i>	260
固态氢在纳米限域中的相行为调控与金属化趋势 李聪	261
压力诱导电子化合物中的超导和磁性性质 丁驰	262
层状碱金属和碱土金属硼氢化物高温超导体的埋论设计 郝玲娟	263
钒和铌的高压熔化与弹性性质:基于第一性原理与机器学习势研究 王豪	
寻找和设计兼具 Kagome 晶格的新型硬质高温超导体 王新伟	
高压下Lu-S 化合物超导结构 预测 美珏	
高温高压条件卜氢对碳酸盐结构和物性的影响 关圣	268
宽温压域下关联电子体系基础物性模拟方法发展 徐远骥	269
高压电子化合物超导体的理论研究 杨国春	
行星内部条件卜热输运的声子非简谐效应 余晓翔	271
局压电子化合物超导体的理论设计与性质研究 张孝华 ···································	
局压卜局温超导三元氢化物的理论预测 朱邦帅	273
压力诱导三元 Xe-C-O 超价化合物中 Xe 配位数的增加 朱金铭	274
B1 相碳化硅宽温压区间机器学习势函数 罗朝波	275

Y-Cl体系中的拓扑电子化合物 梁贻玮
金属锡的冲击动力学特性初步模拟 耿华运
中等压强下电子化合物 Na ₆ C 的超导电性和超离子态行为 王畅
压力诱导 FeCo ₂ Se ₄ 中新型 S=0 自旋态的理论研究 王弈铭
混合阴离子 CuBiSeC12 中应变调制的四声子和相干热输运:超低晶格热导率和增强的热电性
能 曾祥榆
高温高压下锡的多相物态方程与弹性模量的第一性原理计算 陈凯乐
机器学习势在超导体 LaBeH ₈ 的量子效应与非谐效应研究中的应用 董桂言282
钨初级辐照损伤的神经网络分子动力学模拟 杜泽依
高压下富锂化合物中的超导电性和双超离子性 郭淑敏
对称性原理加速的晶体结构预测算法 韩瑜
三元 Cs-In-H 化合物在低压下的高温超导电性研究 黄泓瑜
氢化和氟化过渡金属硼化物 Mo ₂ B 超导电性的理论预测 季润贤
强关联材料模拟的双屏蔽库仑修正方 刘倍雷
10 GPa 下离子化的 σ 键诱导的超导电性 刘鹏叶289
高压下层状 AsN 体光伏效应的理论研究 刘媛媛
高压下 CeH10 的氢空位结构及性质研究 马浩
高通量筛选具备室温超导电性和热力学稳定性的笼型氢化物 马天成
基于 GPUMD 的分子动力学模拟方法开发 潘书宁
利用限域模板在环境条件下截获层状 LP-N 和 HLP-N 王冬雪
E(n)等变的高阶笛卡尔张量消息传递网络 王俊杰
中压下四元双钙钛矿氢化物超导性的理论研究 王敏
Pressure induced enhancement of anharmonicity and optimization of thermoelectric properties in
n-type SnS 王宁
高压下 A15 型三元超导氢化物的理论设计 魏旭东
Pressure-Induced Evolution of Superconductivity and Structural Stability in a Bulk 4Hb-TaSeS
Heterostructure 杨欣
金属铀高温高压相图的声子非简谐效应 余晓翔
Be-Cu 体系机器学习势构建和 Be _x Cu _y 合金物性研究 张雷雷
中等压力下 Li ₃ IrH ₉ 稳健的高温超导电性 赵文迪
间隙阴离子电子促进 Li-As 电子化合物的超导性 赵雅娉
Enhanced electron affinity of xenon in lithium-xenon electrides under high pressure 许帏硕 · 304
专题 E: 高压实验技术
CMRR 中子科学平台与高压中子衍射技术 房雷鸣
冲击高温高压状态下过渡金属电导率的测量技术 张友君
动态载荷下的先进原位多尺度诊断技术及其应用 陈森
低温高压原位光谱测量系统的研制及应用 雷力

压力工程调控光增益行为:从多体系自发辐射到钙钛矿放大自发辐射的阈值演化 李帅锜 309
综合极端条件实验装置—高温高压大体积材料研究系统 刘兆东
高压下材料变形的原位研究 王李平
应用于高压超导研究的高压量子传感与超快光谱技术 于晓辉
上海光源 BL12SW 线站大压机实验站介绍及其在高压科学中的应用 周春银313
南科大-散裂源高压中子谱仪与极端条件平台最新建设进展及规划 朱金龙314
Kinetic control of high pressure phase transitions in anatase TiO ₂ 陈小辉
高压专用衍射线站建设情况及后续初步设想 李守瑞
超高压研究对特种金刚石对顶砧的急迫需求 王森
强激光高压物性实验平台研究进展 王哲斌
四代光源高压非弹性散射谱学方法介绍 徐伟
Development of a multi-anvil apparatus for synergetic extreme condition physics <i>Yoshiya Uwatoko</i>
厘米级腔体流体样品的高温高压长时稳定封装与反应处理 杜明浩
水镁石高压变形及电学响应 高文佳
meV-IXS 实验技术及其在声子探测中的应用 郭志英
高能光源高压线站建设进展 李晓东
基于稳御(MASTer)加热系统的超高温和 7/3 组装的超高压产生 牛国梁325
荧光类二级压标红宝石、Sm ²⁺ :SrB ₄ O ₇ 和Sm ³⁺ :YAG在55GPa和850K下的修正 魏颖展 326
高压变温(4-4000 K)热导率测量方法及应用 岳冬辉
High-Pressure Tuning of Electrical Transport in Freestanding Oxide Films 黄祥
用于大容量压机超高温高压实验的虚拟温度计 丰丙涛
应用于六面顶压机的快速冷却合成块组装设计 吴培衍
高压下范德华半导体 ZnPSe3 的带隙工程和振动特性 苏柔琼
6-8型静高压装置末级压砧的几何结构探索 孙叶武
一种基于二极管 I-V 特性的压力标定技术及其应用 王扬斌
北京高压科学研究中心大腔体压机的压力标定 徐永江
适配 MPMS 磁测量的 10 GPa 金刚石对顶砧高压装置 于瀚林
Introduction to the high-pressure program at SIRIUS, Brazil Danusa do Carmo
专题 F: 高压化学
极端条件下行星内部氢、氦与"冰"复合体系的相变研究 张增明
氟代芳香烃的高压聚合反应与机理 郑海燕
压强诱导 MOFs 材料白光研究 杨新一
金属卤化物压强诱导发光与压致变色调控 肖冠军
无机功能材料中孤对电子的压力调控与物性研究 卜克军
金纳米团簇中压致近红外发光增强研究 陈高松
新型电子化合物的理论预测及其电子特性 李延龄

新型杂化金属卤化物发光材料 权泽卫	
压力响应型光功能材料的探索与机理研究 王凯	
调控 Peierls 畸变增强二维范德华层状材料的二次谐波响应 付同欢	
金刚石纳米线与石墨烷纳米带的高压化学合成 李阔	
基于钻石对顶砧的动态加载技术及相关科学研究 苏磊	
超/亚临界水反应及资源化应用 潘志彦	
加压调控的若干化学反应 李军	350
高压诱导二硫化钨层间耦合作用堆垛依赖性的研究 张泽娟	351
高压调控有机-无机相互作用优化杂化钙钛矿局域结构-提升非线性光学性能 毛禺	鈜 …352
压力调控下二维过渡金属硫族化合物的激发态动力学研究 牛光明	353
高压下纤维素的结构与性能 宋广杰	354
高温高压下绿帘石体系电导率 王多君	355
压强调控零维锑基金属卤化物中的光诱导多面体畸变 王家祥	356
高压下材料的超快动力学 袁开军	357
典型含能材料声子非谐效应与氢键演化的理论及实验研究 郑朝阳	358
间苯二甲酸基金属有机框架的高压磷光性质研究 杨青	359
一维二硫化物基卤化铅中压力诱导的手性转变 邱文博	
通过压力诱导相变提高稀土离子在 BiVO4 中的溶解度 董兴邦	361
压力诱导零维杂化 Sb 基钙钛矿双发射中心的形成与变化 蔡梦瑶	
混合价态化合物 Eu9MgS2B20O41 在压力下的结构稳定性与带隙调控 符博洋	
压力诱导晶体中的分解反应及其反常压致变色行为 郭丽慧	364
热量或高压促进的晶体中点击聚合反应实现荧光增强 韩建军	365
无铅卤化物双钙钛矿(CH3NH3)2PtI6 的压致带隙闭合 侯思羽	
压力和温度双热力学参数识别并调控二维钙钛矿多态发射行为 胡海洋	
压力诱导非晶化驱动的杂化镉卤化物带隙缩小和不可逆色移 黄乙甲	
压力调谐声子辅助机制实现零维杂化锰卤化物高效反斯托克斯发射 刘鑫	369
高压下含能材料的炔基聚合研究 孙澜轩	
Sb3+掺杂的一维双钙钛矿(TMA)2NaInCl6 纳米晶的压力诱导结构相变和性能调控	王文欣
高压下绿光/蓝光稀土 MOFs 荧光增强研究 王艺璇	
压力下锰基卤化物的发光特性研究 原伟祺	
1-甲基-3,4,5-三硝基吡唑的高压结构演化研究 张鸿	
氟诱导零维铅基钙钛矿的反常光学稳定性和压力下增强的发光特性 张一帆	
专题 G: 超硬材料与应用	376
室温高塑性陶瓷的研制 赵智胜	376
厘米级尺寸多晶金刚石透明陶瓷块体的高温高压制备及表征 张佳威	
Defect-mediated hard and superhard solids 王善民	

含系综 NV 色心的单晶金刚石的高温高压制备与表征 王海阔
预应力存储 B4C 复合材料的高韧性研究 陶强
"亚稳态"新型金刚石的高温高压合成 唐虎
硼基轻元素超硬材料的孪晶结构设计与力学性质研究 宋贤齐
B ₆ O 体系陶瓷强韧化研究 刘超
纳米聚晶金刚石的韧性调控及其导电特性研究 朱品文
静高压与动高压下的金刚石 贺端威
天然金刚石成因机制猜想 贾晓鹏
无粘结剂碳化钨及其复合材料的高压制备 马梦冬
镍锰钴触媒变压条件下金刚石大单晶的生长行为研究 赵洪宇
结合剂成分对聚晶金刚石结构演化的影响 刘咏
高压下氮掺杂金刚石的合成及 NV 色心调控 李尚升
高导电高硬度高熵十二硼化物研究 梁拥成
非静水应力下超硬材料的结构设计 刘畅
功能型硬质材料合成与探索 于晓辉
聚晶金刚石与立方氮化硼硬度与耐磨性的关系比较 周礼
新型纳米孪晶超硬材料的结构设计及物性模拟 李全
Sc-Ta-B 化合物结构设计、实验制备与物性研究 翟航
通过高压热扩散实现高电离效率的掺磷 n 型金刚石 董卫国
碳化硼(B4C)室温延展性研究进展 李鹏辉
微米金刚石的氧化和石墨化:从真空到高压的研究 李倩
高压相变/反应制备高性能亚微米多晶 β-Si3N4 与 B4C 侯志强400
泡沫镍嵌套金刚石制备超硬兼具金属导电性的复合材料 孙贵乾401
镍锰钴触媒变压条件下金刚石大单晶的生长行为研究 赵洪宇402
高压高温烧结碳化硅晶须增强高熵(Ti _{0.2} Zr _{0.2} Hf _{0.2} Nb _{0.2} Ta _{0.2})C 陶瓷韧性研究 李昊403
cBN-hBN-SiCw 复合材料性能优化研究 李光乾404
剪切变形驱动少层石墨烯结构和形貌演化 李朋朋405
碳化铼的高温高压制备及其硬度性质研究 宁云雨406
具有优异力学和介电性能的富铌铁矿相 TiO2 纳米陶瓷 石上溪407
WC-Co硬质合金的高温高压烧结研究 柔银兴408
A feasible route to superhard ternary boride at ambient pressure 王泽方
微纳结构自润滑刀具高压渗透制备与强润协同增强技术研究 张治财410
高强六方氮化硼/碳化硅复合陶瓷的合成与性能 诸葛泽文411
石墨化无序碳-纳米金刚石复合材料: 一种兼具优异强度与导电性的新型材料 邹易通 …412
专题 H: 高压地球与行星科学 ······413
高温高压下矿物岩石电导率的实验研究 代立东413
岩石电各向异性的计算及其对地壳熔体和流体的约束 胡海英415

水在下地幔顶部的赋存、分部和迁移 刘兆东416
挥发性元素在地球深部的储存 田艺帆417
地幔转换带三维电性结构揭示林伍德石含水异常 庄毓凯418
克拉通边缘岩浆硫化物矿床深部控制机制的高温高压实验研究 陈春飞419
地核极端温压条件下铁-氢合金的性质 付苏字420
地球大龟裂—高压驱动岩石圈裂解及其降压熔融的热力学效应 唐春安421
含水斯石英高压相变机制 胡清扬422
外地核条件下液态 Fe-Mg 合金热力学性质的第一性原理研究 付洁423
核-幔边界超离子态含水相稳定性的计算研究 何字424
温度引起的碳酸钙非晶化及其超低波速的地学效应 侯明强425
Differentiation of Enstatite chondrite-like planetesimals and planetary embryos 李琼426
高压变形及微观结构与矿物含水状态 刘锦427
实验研究水对第一过渡族元素及镓、锗在角闪石与含水安山质熔体之间的分配系数的影响
刘凌寒
高温高压下橄榄石含水性能的演变特征及其微观机制 刘怡梦429
层状二维三氧化钼的压力诱导相变与宽谱光响应 柳凯祥430
基于机器学习的二氧化硅相变和弹性研究:对地球地幔不连续面的启示 王川431
Superionic behavior of oxygen defected davemaoite and its impact on early Earth oxidation 王子范
地球外核中液态铁轻元素合金的第一性原理分子动力学研究 谢妙栩433
极端冲击条件下 MgSiO3 的汽化研究 徐飞洋434
深部岩浆洋环境中三价铁的稳定化 张宏罗435
闪石族矿物高压相变与亚稳态的原位拉曼光谱研究 郑直436
下地幔顶部温压条件下 CaAl2O4-MgAl2O4 体系相关系的高温高压实验研究 何金泽437
专题 I: 冲击波与爆轰物理 ······438
冲击加载下物质结构相变的实验和理论协同研究 戴佳钰438
基于先进光源的典型金属材料冲击相变研究 蔡洋439
冲击熔融铁的热状态方程研究 甘波440
冲击下 SiO2 的物理力学行为研究 宋文豪441
金属材料动态损伤破坏: 辐照缺陷和复杂加载条件的影响机理与理论模型 周婷婷442
冲击波加载条件下先进金属材料的孪生行为 张帆443
强冲击下金属界面破碎演化的数值模拟与理论模型研究 王欣欣444
二次非稳态冲击下含氦泡金属铜界面动态破坏的分子动力学模拟 鲍强445
基于机器学习势的碳化硼陶瓷力学行为与机理研究 李君446
分子流体冲击致冷效应的物理机制研究进展 刘福生447
冲击压缩条件下材料相变的判据——黏性 马小娟448
水下爆炸近场冲击波与多相界面相互作用过程研究 徐维铮449

基于超临界二氧化碳膨胀的模拟爆炸加载试验技术 姚术健450
等熵与冲击加载路径下的多晶塑性本构 沈耀451
复杂路径加载下物质宏-介-微观多尺度研究技术 贺芝宇453
纵向气隙影响下不同类型炸药爆轰输出性能的对比研究 郭文灿454
弹药殉爆载荷特征及防护技术研究 何杨455
Competition in phase transformation pathways under shock compression revealed the abnormal
phase boundary shifts 李江涛
TATB 基 PBX 炸药冲击起爆温度和密度效应研究 李淑睿457
冲击压缩下单晶 MgO 的各向异性弹-塑性转变研究 刘勋458
轻质金属多孔夹芯结构的弹道极限行为 秦庆华459
复杂加载历程下金属动态损伤机理及模型 隋吴男460
含氦泡双晶铜高应变率压缩/拉伸响应研究 朱琪461
动态强度超高的金刚石-TiC 复合材料研究 郑伟462
U-6 wt.% Nb 合金冲击响应的微观机理 王昆
激光加载下炸药晶体内孔洞缺陷演化及热点形成规律研究 马骁464
冲击加载下纳米晶高熵合金多层级变形机制与强度演化 李旺辉465
含气疏松金属的冲击压缩响应 伍鲍466
动态强度超高的金刚石-TiC 复合材料研究 郑伟467
冲击加载下金属铜中氦泡诱导温升与波前展宽机理研究 阎圣宁468
Direct visualization of laser-driven dynamic fragmentation in tin by in situ X-ray diffraction 杨靖
专题 K: 高压卓青(特邀)470
强冲击下金属界面破碎演化的数值模拟与理论模型研究 王欣欣470
铈氢化物高温超导体的高压实验研究 黄晓丽471
高压下的新结构、新规律和新方法 董校472
Redox impacting the deep Earth 林彦蒿
极端条件下的玻璃碳 曾徵丹474
机器学习驱动的物质模拟方法发展及其应用475

Structure studies under high-pressure conditions using synchrotron XRD technique: Typical superconducting materials and their phase diagrams

<u>Arthur Haozhe Liu (刘浩喆)¹</u>, Lisa Luhongwang Liu (王鲁红)²

北京高压科学研究中心
上海前瞻物质科学研究院
Email: <u>haozhe.liu@hpstar.ac.cn</u>, <u>lisaliu@sharps.ac.cn</u>

摘要:

The current state-of-the-art synchrotron x-ray techniques combined with diamond anvil cell (DAC) and large volume press (LVP) techniques make phase transition studies one of most active, burgeoning fields in the high pressure community. The structural evolution of material under pressure is the long-term active research subject, which in fact strongly depends on the development of corresponding high pressure and synchrotron technologies. Many interesting results, such as high T_c superconductivity under high pressure conditions, were reported in last decade, but the responsible structures are not well studied at correct P-T conditions and mechanisms are far away from fully understood. In this presentation, several selected systems were *in situ* studied under high pressure using synchrotron x-ray diffraction (XRD) techniques in DAC at ambient temperature and low temperature conditions, will be introduced. Selected cases, including pure element cases of Ti and Sc, several typical metal hydrides, and new & old oxide (Ni-O, Bi-O, etc.) systems, would be discussed based on the recent XRD results and the first principle calculations, and the updated phase diagrams at low-temperature and high-pressure domains.

关键词: High Pressure, Synchrotron XRD, Phase Transitions, Phase Diagram

参考文献:

- 1. Zhiwen Li, et al, High pressure synthesis & superconductivity of ytterbium polyhydrides, *Chinese Physics Letters*, 42, 047401, 2025.
- 2. Jinyu Han, et al, Superconducting-insulating phase transition in pressurized Ba_{1-x}K_xBiO₃, *Physical Review B*, 111, L020509, 2025.
- 3. Luhong Wang, et al, Structure responsible for the superconducting state in La₃Ni₂O₇ at high pressure and low temperature conditions, *Journal of the American Chemical Society*, 146, 11, 7506-7514, 2024.
- 4. Xin He, et al, Superconductivity discovered in niobium polyhydride at high pressure, *Materials Today Physics*, 40, 101298, 2024.
- 5. Zhiwen Li, et al, Superconductivity above 70 K observed in lutetium polyhydrides, *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 66, 6: 267411, 2023.
- 6. Xin He, et al, Superconductivity above 30 K achieved in dense scandium, *Chinese Physics Letters*, 40, 107403, 2023.
- Changling Zhang, et al, Superconductivity above 80 K in polyhydrides of hafnium, *Materials Today Physics*, 27, 100826, 2022.
- 8. Zhiwen Li, et al, Superconductivity above 200 K discovered in superhydrides of calcium, *Nature Communications*, 13, 2863, 2022.
- 9. Changling Zhang, et al, Record high *Tc* element superconductivity achieved in titanium, *Nature Communications*, 13, 5411, 2022.

纳米孪晶金刚石的协同硬化/韧化机理

燕山大学亚稳材料全国重点实验室,高压科学中心,秦皇岛,066004 Email: tongke@ysu.edu.cn

摘要:

金刚石是自然界中最硬的材料,作为机械加工、油气开采和地质勘探等领域不可或缺的战略性材料, 受到世界各工业发达国家的高度重视。与金属材料相比,金刚石的化学键强度更高且具有方向性,导致 位错形核和滑移困难,易发生脆性断裂,协同提升金刚石材料的硬度和韧性是材料科学研究中的重要挑 战之一。本工作聚焦于金刚石界面,借助 STEM 系统地研究了纳米孪晶金刚石非共格孪晶界的界面结 构,并借助电子辐照荷电效应所产生的机械应力,原位记录了室温下非共格孪晶界的结构转变和迁移的 动态过程。发现了纳米孪晶金刚石中非共格孪晶界以低能量、低迁移率的非对称构型为主,即便在孪晶 厚度低至约 1nm 时依然如此,从而导致了纳米孪晶金刚石的持续硬化行为。此外,理论计算结果表明 金刚石中共格孪晶界和共格相界的迁移伴随着显著的能量损耗,从而可以大幅提升金刚石材料的韧性。 这些研究成果厘清了纳米孪晶金刚石及其复合材料的强韧化机理,揭示了纳米孪晶金刚石协同硬化的物 理本源,为开发更硬更韧的金刚石材料提供了理论指导。

关键词: 金刚石; 纳米孪晶; 硬度; 韧性; 强韧机理 参考文献

- Ke Tong#; Xiang Zhang#; Zihe Li#; Yanbin Wang; Kun Luo; Chenming Li; Tianye Jin; Yuqing Chang; Song Zhao; Yingju Wu; Yufei Gao; Baozhong Li; Guoying Gao; Zhisheng Zhao; Lin Wang; Anmin Nie; Dongli Yu; Zhongyuan Liu; Alexander V. Soldatov; Wentao Hu*; Bo Xu*; Yongjun Tian*; Structural transition and migration of incoherent twin boundary in diamond, Nature, 2024, 626: 79-85
- Zhang Su#; Xiao-Ji Weng#; Xi Shao#; Ke Tong*; Yong Liu; Zhisheng Zhao; Xiang-Feng Zhou*; Yongjun Tian; Coherent interface migration toughens diamond, Advanced Functional Materials, 2025, 35: 2409122

高压下有机-无机杂化配位化合物的结构演化和物性研究

蔡伟照

电子科技大学材料与能源学院

Email: wzhcai@uestc.edu.cn

摘要:

有机-无机杂化配位化合物由于其可调的电子结构、独特的结构灵活性及对外部刺激的响应性,在 非线性光学、压电传感等领域展现出巨大潜力。近年来,配位化合物和杂化卤化物作为此类体系的典型 代表,其高压下单晶的结构相变、电子结构以及相关物性的研究仍具挑战。本报告主要包括我们最近对 两类不同体系的研究,观察到非常有意思的压力响应现象。^[1,2]例如,我们研究了在卤化物的 A 位中分 别引入柔性和刚性阳离子,在高压下观察到不同的结构演化与物性响应差异。

1. 柔性阳离子体系 ([NH₃(CH₂)₂S-S(CH₂)₂NH₃]PbI₅·H₃O)^[3]

。 高压诱导手性转换: 在~0.10 GPa下, 柔性阳离子通过构象自适应, 驱动晶体从对映体(conglomerate) 向外消旋体(racemate)的可逆相变, 伴随二次谐波(SHG)信号"开-关"切换。

○ 有机-无机协同压缩: 阳离子形变导致一维 Z 字型 PbⅠ₆链的显著畸变,但电子结构主要由无机骨架主导,带隙仅轻微减小。

2. 刚性阳离子体系 ((MV)BiBr5, MV = 甲基紫精)^[4]

。高压不可逆相变与机械响应:在0.20 GPa下,刚性 MV²⁺阳离子 90°旋转引发 BiBr₆八面体畸变及 Bi³⁺
孤对电子激活,导致晶体长度膨胀 20–30%及颜色红→黄转变。相变后高压相γ可通过机械刺激(如针触)
逆转为原始相,展现独特动态行为。

。 强氢键锁定效应:新形成的 CH…Br 氢键稳定高压亚稳相,抑制减压自发恢复。通过压力工程手段, 成功截获高压相。

本报告我们将总结高压下不同类型的有机-无机杂化配位化合物的结构相变对物性的影响规律,阐明结构畸变对电子结构等性质的影响机制,为设计常压下性能优异的晶态材料提供参考。

关键词:单晶衍射,配合化合物,结构相变,动态响应参考文献

- 1. He, W.; Li, Q.; Liu, Y.; Fu, B.; Li, W.; Zhou, L.; Cai, W. Inorg. Chem. 2025, 64, 7337-7347.
- Du, Z.-Y.; Xie, M.; Qiu, W.; Han, D.-C.; Zhang, S.-Y.; Zeng, Y.; Cai, W.; Nakamura, T.; Huang, R.-K.; He, C.-T., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202500027.
- 3. Qiu, W.; He, W.; Liu, Y.; Fu, B.; Wang, W.; He, J.; Wang, L.; Liu, H.; Cai, W., Chem. Mater. 2025, 37, 8, 2953–2963.
- 4. Zhang, D.; Fu, B.; He, W.; Li, H.; Liu, F.; Wang, L.; Liu, H.; Zhou, L.; Cai, W., Nat. Commun. 2024, 15, 6678.

极端条件下含能材料的结构相变与分解反应研究

代如成、孙晓宇、王鹤、王昊、王中平、张增明

中国科学技术大学物理学院

Email: dairc@ustc.edu.cn

摘要:

含能材料的能量与感度协同调控是火炸药领域的重要挑战。在温压加载条件下,含能材料会发生结构相变或产生缺陷,进而影响含能材料的爆轰行为,也易引起安全事故。本文主要探究共晶炸药在高温和高压加载下的结构演化与分解反应研究。利用X射线衍射、拉曼光谱和热分析等手段探究了CL-20/DNB共晶样品的热分解动力学过程,获得共晶非均相分解的规律;高温高压下CL-20/DNB共晶的分解边界,实现了压力对分解温度的调控。探究了CL-20/TNT共晶在高温高压下的分解过程,高温下共晶中的TNT成分会在相变前升华而脱离体系,压力对CL-20/TNT共晶热分解过程的抑制作用。探究了高温下CL-20/HMX共晶的分解过程以及压致结构相变行为,获得CL-20/HMX共晶高压相变压力点及温压相图。该研究为力热刺激加载下共晶炸药稳定性的调控机制提供了科学依据。



图 1 温压加载下共晶炸药的结构演化行为

关键词:极端条件;含能材料;结构相变;分解反应参考文献

- 1. Liang WT, Sun XY, Wang H, et.al. Phys. Chem. Chem. Phys. 2023, 25, 15756-15766.
- 2. Sun XY, Liang WT, Li XD, et al. Spectrochim. Acta A. 2023, 292, 122436.

超硬材料的理论设计与实验合成

高国英、孙荣鑫、王林妍、魏旭东、张振邦、徐波、田永君

燕山大学亚稳材料全国重点实验室 Email: gaoguoying@ysu.edu.cn

摘要:

超硬材料(Hv>40 GPa)具有优越的硬度、不可压缩性和耐磨性,被广泛使用于机械加工及高压科学等领域。现阶段,超硬材料仍主要局限于金刚石和立方氮化硼,两者早在上世纪 50 年代就已实现了人工合成[1,2]。近期的研究表明,纳米结构化是提升超硬材料硬度的有效途径,例如纳米晶金刚石、纳米晶立方氮化硼、纳米孪晶金刚石、纳米孪晶立方氮化硼等[3-6]。能否将纳米结构化策略应用于传统的硬质材料(Hv<40 GPa),从而制备出异于金刚石和立方氮化硼的新型超硬材料,是超硬材料研究的重要挑战之一。

我们将纳米结构化策略引入到碳化硅这一传统的硬质材料,在高温高压条件下成功制备出纳米晶结构的立方碳化硅致密块材,块材中平均晶粒尺寸低至 10 nm[7]。受益于这种独特的显微组织结构,块材的维氏硬度最高达 41.5GPa,相较于商用碳化硅大幅度提高,可媲美单晶立方氮化硼。块材的断裂韧性为 3.6MPa·m0.5,与商业 SiC 块材相当。该研究首次将立方碳化硅这一传统硬质材料提升为超硬材料, 扩大了超硬材料家族成员,是超硬材料研究领域的重要进展。

此外,我们还以高纯度(≥99.9%)、平均粒径为55nm 且颗粒内部存在高密度晶格缺陷的 SiC 纳米 粉为原料,通过酸洗对纳米粉进行处理,在压力25GPa、烧结温度1500℃的条件下,制备的块材硬度 为32.3GPa,同时断裂韧性提升至4.8MPa·m0.5,相较于商业 SiC 块材分别提升了约35%和25%[8]。该研究在获得优异综合性能的碳化硅块材方面取得了显著的进步。

关键词:(超硬材料、纳米晶、碳化硅、高温高压、维氏硬度)

参考文献

- 1. F. P. Bundy, H. T. Hall, H. M. Strong, R. H. Wentorfjun, Nature 176, 51 (1955).
- 2. R. H. Wentorf, J. Chem. Phys. 26, 956 (1957)
- 3. V. L. Solozhenko, O. O. Kurakevych, Y. Le Godec, Adv. Mater. 24, 1540 (2012)
- 4. T. Irifune, A. Kurio, S. Sakamoto, T. Inoue, H. Sumiya, Nature 421, 599 (2003)
- Y.J. Tian, B. Xu, D.L. Yu, Y.M. Ma, Y.B. Wang, Y.B. Jiang, W.T. Hu, C.C. Tang, Y. F. Gao, K. Luo, Z.S. Zhao, L.-M. Wang, B. Wen, J.L. He, Z.Y. Liu, Nature 493, 385 (2013).
- Q. Huang, D.L. Yu, B. Xu, W.T. Hu, Y.M. Ma, Y.B. Wang, Z.S. Zhao, B. Wen, J.L. He, Z.Y. Liu, Y.J. Tian, Nature 510, 250 (2014)
- 7. R.X. Sun, W.T. Hu, D.L. Yu, L. Wang, G.Y. Gao*, B. Xu*, Y.J. Tian et al., Small 18, 2201212 ((2022))
- 8. R.X. Sun, Y.F. Gao, D.L. Yu, B. Xu*, G.Y. Gao*, Y.J. Tian et al. J. Eur. Ceram. Soc. 45, 116829 (2024)

高温高压下钝感含能材料在高温水中的性质研究

郜婵¹、王君可²、罗汉山¹、冯椿婷¹、郑旭¹、张增明².

¹成都理工大学,物理学院 ²中国科学技术大,学物理学院 Email: gaochan@cdut.edu.cn

摘要:

含能材料在温度、压力等外界刺激下所引起的多晶型转化及其热力学响应特性会直接影响炸药的能量和感度,理解炸药在温压耦合刺激下的结构演化及热力学响应机制对于炸药的贮存、结构稳定性及安全性评估有着十分重要的意义。3,3'-二氨基-4,4'-氧化偶氮呋咱 (DAAF)和1-氧-2,6-二氨基-3,5-二硝基吡嗪(LLM-105)是两种具有良好爆轰性能的高能钝感含能材料,DAAF及LLM-105的层状π堆积结构以及分子结构中存在的氢键网络对其低感度及结构稳定性起着不可忽视的作用。特别地,温压耦合的条件下,引入水会直接影响它们结构中的次级键相互作用,并导致高温高压下DAAF、LLM-105的结构演化规律、化学分解机制及溶解度发生改变。本文采用外加热式高温高压金刚石对顶砧,结合原位拉曼、红外光谱、显微成像等多种实验手段,研究高温高压条件下水对钝感含能材料DAAF、LLM-105的结构演化规律及初始分解反应,从分子水平上认识它们感度的本质;研究不同温压加载条件下,DAAF、LLM-105在水中的溶解度变化及溶解重结晶产物的结构和热力学性质表征,并获得重结晶产物在压力下的结构演化规律,为设计和调控新颖含能材料提供科学依据。



图 1 高温高压下, LLM-105 和 DAAF 的溶解重结晶及分解反应

关键词:高温高压,LLM-105,DAAF,高温水,初始分解 参考文献

1. Z. He, J. Chen, Q. Wu and G. Ji, RSC Adv., 2016, 6, 93103.

- 2. C. Gao, J. Wang, J. Wang, R. Dai, Z. Wang, Z. Zhang, Combustion and Flame. 2022, 240, 111981.
- 3. J. Wang, X. Sun, C. Gao, Z. Xu, D. Mai, R. Dai, Z. Wang, H. Li, Z. Zhang, ACS Omega2023, 8, 24654.

基于羰基有机小分子的高压光学性质研究

<u>李龙</u>

聊城大学物理科学与信息工程学院 Email: 11323529219@gmail.com

摘要:

近年来,非传统发光材料由于具有制备简单,生物相容性好,无重金属污染的特点,受到了广泛的 关注。然而,由于无典型的发光基团和不理想的聚集,实现非传统发光材料的高效发射仍然是一个巨大 的挑战。我们在有机小分子材料中引入了"压力聚集诱导",在高压下,羰基聚集导致 O...O 距离不断 减小,最终导致了光致发光的增强。令人惊奇的是,有机小分子材料从不同压力释放到环境条件下,保 留在环境条件下的羰基的聚集程度不同,导致光致发光强度从基本不变到高达 10 倍的增强,荧光量子 产率也从 2.4%提高至 30.0%,另外,发现了从深蓝色 (367 nm)到亮白色 (512 nm)的超宽发射可调 性,最终实现了在压力处理后的环境条件下强度可调颜色可控稳定的光致发光行为。



图1不同压力处理前后环境条件下的荧光光谱

关键词: 高压, 有机小分子材料, 光致发光

参考文献

1. X. Zhao, M. Wu, H. Liu, Y. Wang, K. Wang, X. Yang, et al.Advanced Functional Materials 2021 Vol. 32 Issue 10 DOI: 10.1002/adfm.202109277

2. T. Zhang, X. Yong, J. Yu, Y. Wang, M. Wu, Q. Yang, et al.Adv Mater 2023 Vol. 35 Issue 23 Pages e2211729 Accession Number: 36960911 DOI: 10.1002/adma.202211729

3. Q. Yang, Y. Wang, G. Niu, L. Sui, X. Yang and B. Zou Advanced Functional Materials 2024 DOI: 10.1002/adfm.202418909

高压下光电功能材料的物性调控

<u>李全军</u>

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: liquanjun@jlu.edu.cn

摘要:

光电材料的性能调控对其在光电子产业的应用具有重要的科学意义。材料的能带结构通常决定了其 光电性能和光谱响应范围,适当的带隙和光跃迁类型可以显著地提升材料的物性和应用范围。压力,作 为一种干净的物理调控手段,可以有效调节材料的晶格结构、电子结构等来改变材料的性质,为调控材 料的光电性能提供了可能。近年来,我们提出了利用高压技术拓展功能材料的光谱响应范围和提升其光 电性能的新策略,并成功地应用于碘化物等功能材料的光电响应性能调控上[1-5]。通过利用高压连续调 节材料的带隙和光学吸收特性,成功地将碘化物等功能材料的光谱响应范围拓展至近红外波段(覆盖光 通讯波段),并且在高压下实现了数个量级的光电性能提升。此外,我们还发现压力可以调节材料光电 响应的类型等,实现了光-热协同增强的光电性能、自驱动光电探测、正-负光电流转换等。这些结果表 明,高压是一种能够通过诱导结构相变、调控能带结构和光跃迁类型来改变功能材料光电性能的有效途 径,这为设计新型光电功能材料提供了一种新的压力工程策略。

关键词: 高压; 光电特性; 结构相变; 电子结构

参考文献

- Zonglun Li, Quanjun Li,* Haiyan Li, Lei Yue, Dianlong Zhao, Fuyu Tian, Qing Dong, Xueting Zhang, Xilian Jin, Lijun Zhang, Ran Liu, and Bingbing Liu*, *Adv. Funct. Mater.* 2022, 8, 2108636.
- Zonglun Li, Binxia Jia, Sixue Fang, Quanjun Li,* Fuyu Tian, Haiyan Li, Ran Liu, Yucheng Liu,* Lijun Zhang, Shengzhong (Frank) Liu, and Bingbing Liu*, *Adv. Sci.* 2023, 10, 2205837.
- Lei Yue, Zonglun Li, Linchao Yu, Kunbo Xu, Ran Liu, Chenyi Li, Yanchun Li, Dongliang Yang, Xiaodong Li, Quanjun Li,* and Bingbing Liu,* J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 25245-25252.
- Zonglun Li, Shuxin Chen, Fuyu Tian, Sixue Fang, Quanjun Li,* Mingyang Du, BaoYuan, Le Kang,* Lijun Zhang, Bingbing Liu,* Acta Mater. 2024, 278, 120263.
- Lei Yue, Fuyu Tian, Ran Liu, Zonglun Li, Ruixin Li, Chenyi Li, Yanchun Li, Dongliang Yang, Xiaodong Li, Quanjun Li,* Lijun Zhang,* and Bingbing Liu*, 2025, Natl. Sci. Rev. nwae419.

硬且特别导电的铜硼化合物

周向锋

燕山大学高压科学中心 Email: xfzhou@ysu.edu.cn

摘要:

金属硼化物是一类具有强耐磨性、抗腐蚀性、耐高温、高硬度的多功能陶瓷材料,在化工、医药、冶金、 国防等部门广泛使用。尽管硼在高温下能与绝大多数金属反应,但未见关于 IB 族(铜、银、金)金属硼 化物的报道。铜(Cu)和硼(B)作为不互溶元素的代表,只有少数关于铜-硼固溶体的报道,例如 CuB-23和 CuB-28,源于硼和这些金属具有相近的电负性和较大差别的原子半径,两者之间电荷转移困难,不能形 成具有精确化学计量比的化合物。直至 2021 年,周向锋、徐波等人通过分子束外延生长技术(MBE)首 次成功合成二维铜硼化合物 Cu₈B₁₄ [Fundam. Res. 1,482 (2021)],证实铜原子与硼原子在极端条件下可 以形成化学键¹。受此启发,周向锋、徐波、田永君等在高温高压下合成并表征了新型三维铜硼化合物 Cu_{1.97}B₂₅,发现它是一个既硬又导电的新陶瓷材料²。其测量的维氏硬度~27 GPa,室温电导率可达 10⁵ S/m,在所有以 B₁₂二十面体为结构基元的硼化物中电导率最高。不仅如此,Cu_{1.97}B₂₅在低温常压下, 或低温高压下,发生金属-绝缘体转变。且在 30 GPa 左右,发生导电类型转变 (*p-n* 转变),实验证明这 些现象均源于电子相变,和结构相变无关。因此,新型铜硼化合物不仅在常压下具有优异的物理性质, 并且在极端条件下表现出丰富的量子行为。鉴于它优异的导电性和三维硼网格本征的低热导率,该材料 可能在热电转化领域具有重要应用前景。并且以 Cu_{1.97}B₂₅为母体结构,改变其化学成分,通过调节晶格 间隙处金属原子的类型和含量,或者对 B₁₂二十面体进行掺杂,预期会发现更多新颖现象和新奇性质, 例如超导。

关键词: 高温高压、铜硼化合物、硬度、电导率 参考文献

- 1. C. Yue, X. J. Weng, G. Gao, A. R. Oganov, X. Dong, X. Shao, B. Xu, H. T. Wang, X. F. Zhou, and Y. Tian, Formation of two-dimensional copper boride on Cu(111). Fundam. Res. 1, 482 (2021).
- M. X. Huang, C. Z. Fan, B. Xu, J. Hou, X. Shao, X. J. Weng, X. Zhang, W. Hu, Y. Gao, L. Wang, Z. Zhao, G. Yang, D. Zhang, Y. Wang, Z. Liu, X. F. Zhou, and Y. Tian, Hard copper boride with exceptional conductivity. Phys. Rev. Lett. 133, 136301 (2024).

金刚石材料:显微结构工程、界面与相变

徐波

燕山大学亚稳材料全国重点实验室

摘要

金刚石以其卓越的硬度、热导率、宽带隙和光学透明度而闻名,在众多科学和工业领域中发 挥着重要作用。然而,其固有的脆性和有限的韧性限制了其更广泛的应用。为了克服这些缺 陷,研究人员进行了深入的研究和开发,推出了多种创新金刚石材料,如纳米孪晶金刚石及 其复合材料、金刚石-石墨复合材料等。这些新型材料展现出优异的力学和物理特性。本报 告将详细探讨金刚石材料的最新进展,特别关注金刚石显微结构的精细设计和调控。我们还 将深入探讨静高压下石墨向金刚石相变的复杂机制,以及纳米孪晶金刚石中非共格孪晶界的 结构、作用及其对提高材料强韧性的影响。此外,这些进展不仅为优化金刚石的材料性能提 供了新的启发,还扩展了其在技术领域的应用范围,预示着基于金刚石材料创新技术的新纪 元即将到来。

高压技术一从认知深化到实践拓展

缑慧阳*

北京高压科学研究中心新型功能材料组,北京,邮编 100193 *Email: <u>huiyang.gou@hpstar.ac.cn, huiyang.gou@gmail.com</u>

摘要

压强作为除温度和组分之外的关键热力学参数,在高压条件下,物质呈现出与常规条件下截 然不同的物理与化学行为,揭示了一个全新的物质世界。随着高压技术的飞速发展,研究者 们获得了前所未有的实验工具,不仅能够突破常规条件下的物质相态极限,还为物质科学的 创新提供了广阔的探索空间。本报告将重点分享课题组在大腔体压机环境下压力和温度的扩 展以及高压单晶技术的提升,旨在为深入探索未知物质相态和开发新型功能材料提供重要支 持和动力。基于这些技术,将探讨讨论准一维和二维功能材料在高压条件下的相变演化机制, 及其在这一极端环境下所呈现的独特物理化学性质,为新型功能物质的截获和设计提供科学 依据。

高压下富氢化合物的结构及超导性质研究

<u>段德芳 ^{1,*}</u>,张子涵¹,蒋琪雯¹,安德成¹,赵文迪¹,马天成¹,崔田^{2,1} ¹吉林大学物理学院;²宁波大学物理科学及技术学院 *Email: duandf@ilu.edu.cn

近年来,高压下富氢超导材料研究取得了重要突破,H₃S、LaH₁₀和CaH₆等富氢化合物在高压下(>150 GPa)展现出 200 K 以上的超导转变温度,但是这些材料合成压力高,很难截获到低压和常压条件,大 大限制了其应用研究。针对这一领域"降低稳定压力"和"提升超导温度"两大科学问题,本研究通过第一 性原理计算与晶体结构搜索技术相结合,系统探索了新型氢基超导材料的设计与优化。针对第一个科学 问题,提出了"预压缩"氢合金骨架理论,设计了系列类萤石结构的氢合金骨架超导体,尤其LaBeH₈ 的动力学稳定压力降至 20 GPa,同时理论超导温度高达 185 K,已经被实验证实。针对第二个科学问题, 构建了笼型氢化物预测超导转变温度的 AE 模型,结合自建数据库,在大体系三元笼型氢化物中筛选出 了若干兼备热力学稳定性和室温超导电性的氢化物,如*Fd*-3*m*-Li₂NaH₁₇在 220 GPa 的超导温度为 357 K。 这些研究成果不仅深化了对高压氢化物超导机制的认识,也为实现实用化室温超导材料提供了新的理论 指导和材料体系。

关键词: 高压; 第一性原理; 富氢化合物; 晶体结构; 高温超导

参考文献

1. Z. Zhang, T. Cui, M. J. Hutcheon, A. M. Shipley, H. Song, M. Du, V. Z. Kresin, D. Duan, C. J. Pickard and Y. Yao, "Design Principles for High-Temperature Superconductors with a Hydrogen-Based Alloy Backbone at Moderate Pressure", *Phys. Rev. Lett.* **128**, 047001 (2022).

2. D. An, L. J. Conway, D. Duan, Z. Zhang, Q. Jiang, H. Song, Z. Huo, C. J. Pickard, and T. Cui, Prediction of Thermodynamically Stable Room-Temperature Superconductors in Li–Na Hydrides Under High Pressure, Adv. Funct. Mater. n/a, 2418692 (2024).

低维功能晶体材料的设计及压力调控

陈旭

中科院物理所 xchen@iphy.ac.cn

摘要:低维功能晶体材料由于其量子限域等效应往往展现出许多奇异的电子关联特性,并且 这些性质对于压力调控的有着独特响应行为。

本文中我们设计并制备出了三种的新型低维功能晶体材料,包括:1.全无机"超原子"超导体Au6Te12Se8,其中展现出二维超导、超原子 CDW、反极化金属态、类铁电极化等性质,以及超导与 CDW 对压力异常敏感现象;2.二维金属 Pb 体系(RO)nPb,其中 Pb 展现出异常的负价态,并且再高压下出现二维超导行为;高分子团簇复合材料(t-BA)1-x(t-AA)xFeCl4,并且在其相边界处发现高灵敏压力响应的非线性光学开关。

In2Tes 中非晶相变增强的超导电性

赵毅', 应天平 2*, 吴珏霏', 赵凌霄', 裴翠颖', 王琦', 曹渭征', 李昌华',

陈垂针 3*. 齐彦鹏 1*

上海科技大学物质科学与技术学院,上海,201210
中国科学院物理所,北京,100190
苏州大学物理科学与技术学院,苏州,215006
Email: giyp@shanghaitech.edu.cn

摘要:

在材料科学与工程中,相图是一个重要的研究工具,其构建遵循吉布斯相律(F=C-P+2,其中F 为自由度,C为组元数,P为相数)。传统相边界通常表现为相变区内物理性质的突变(F=1)。本研究 发现,通过部分破坏长程平移对称性,可以将传统相边界拓展为包含宽化非晶过渡区的结构(F=2), 并在高压 In2Tes单晶中首次观测到晶态-非晶态-晶态(CAC)的序贯转变过程。通过原位同步辐射衍射 分析发现,这一转变源于[In2Te2]²⁺刚性结构单元的旋转及其与铰链状[Te3]²⁻三聚体的动态耦合作用。特 别值得注意的是,在非晶态区,超导转变温度(T_c)提升了25%,而载流子浓度几乎保持不变。结合理 论建模,我们推测超导增强可能与结构无序诱导的电子态多重分形特性及其对电子关联效应的增强有 关。这一发现不仅揭示了无序结构对相变和物性的调控机制,也为探索相边界上的新颖物理现象提供了 新思路。



图 1 In₂Te₅ 晶态-非晶态-晶态(CAC)相变的微观机制与实验证据

关键词:超导电性,结构相变,非晶相变 参考文献:

 Y. Zhao, T. Ying, L. Zhao, J. Wu, et al., Disorder-Broadened Phase Boundary with Enhanced Amorphous Superconductivity in Pressurized In₂Te₅. Adv. Mater. 2024, 36, 2401118.

专题代号: A

高压下物质的介电性质研究

韩永昊、赵琳、赵星星、韩涛

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 吉林大学物理学院 Email: hanyh@jlu.edu.cn

物质的电学性质研究是高压科学的重要组成部分。以电阻和霍尔效应测量为代表的高压原位测量方 法已在压致超导现象研究中发挥了重要的作用。与直流电阻测量方法相比,交流阻抗谱测量主要面向物 质的介电特性和离子传输等研究领域。本报告将主要介绍基于交流阻抗谱方法,物质在高压下的介电性 质、离子输运性质和电致伸缩效应的研究工作。



图 1 高压下 AgI 的超离子态相变



图 2 高压下 CaZrO3 的电致伸缩效应

关键词: 高压、金刚石对顶砧、交流阻抗谱、介电性质

参考文献:

- 1. Y. H. Han, H. B. Wang, I. A. Troyan, C. X. Gao, M. I. Eremets, J. Chem. Phys. 2014, 140, 044708.
- 2. X.X. Zhao, Z. F. Xing, L. Ma, D. Peng, J. Q. Cai, Y. H. Han, L. Zhao, Appl. Phys. Lett. 2024, 124, 012102
- 3. T. Han, H. Liu, J. Wang, C. X. Gao, Y. H. Han, J. Phys. Chem. C 2021, 125, 8788-8793.

氢 IV 相的 X 射线单晶衍射研究及对氢金属化过程的启示

<u>吉诚、李冰、丁阳、杨文革、毛河光</u>

北京高压科学研究中心 Email: maohk@hpstar.ac.cn

摘要:

金属氢是高压领域最引人瞩目的研究课题之一。要研究金属氢,须攻克两大难题:一是改进静态压缩技 术以制备金属氢,二是发展诊断技术以准确测量其物理性质。近年来,我们见证了超高压生成技术的突 飞猛进,特别是二级砧[1]和环形砧[2,3]技术的突破。目前,已有研究宣称在 400 万大气压附近实现了 氢的金属化[4-6]。此时,第二个任务(即开发先进技术以全面表征极端压力下金属氢的特性)就显得尤 为迫切。众所周知,掌握金属氢的晶体结构是理解其性质所需的最基本的信息。尽管同步辐射红外光谱 [4,6]和激光拉曼光谱[7]一直是绘制固态氢相图的主要技术手段,但它们只能间接探测氢的晶体结构。 在超高压下直接测量固态氢的晶体结构则极具挑战性,目前完全依赖同步辐射 X 射线衍射(XRD)技 术。2019年,我们在氢的晶体学方面取得了技术突破,首次实现了 200 GPa 以上固态氢的 XRD 测量, 发现 IV 相存在等结构相变并伴随明显压缩率变化[8]。该突破得益于能够耦合大面积探测器的多通道准 直器及单色 X 射线纳米探针技术的开发。但由于当时技术限制,遗憾未能获得来自同一晶畴的单晶衍 射斑点,因此无法验证除六方密堆积(hcp)模型外的其他理论模型。通过数年的技术探索,我们现已 利用纳米探针技术实现了超高压下固态氢的单晶 XRD (SCXRD)测量[9]。IV 相的 SCXRD 数据最终检 测到原始 hcp 晶格(I 相)不允许存在的弱超晶格衍射峰,表明其具有六倍于原胞尺寸且对称性更低的 后 hcp 结构。理论计算显示,具有部分类石墨烯层的 P-62c 模型能合理解释 SCXRD 数据。这些结果表 明氢在金属化过程中经历了"聚合"过程。我们的研究不仅为理解氢的金属化机制提供了可靠的参考,更 为未来在更高压力下直接探索金属氢的晶体结构提供了强有力的晶体学实验工具。

关键词:(氢、晶体学、纳米聚焦单晶衍射、金属化)

参考文献(中文小五号宋体,其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

1 Dubrovinsky, L., Dubrovinskaia, N., Prakapenka, V. B., Abakumov, A. M., Nat Comm 3 (2012) 1163.

2 Dewaele, A., et al., Nat Comm 9 (2018) 2913.

3 Jenei, Z., et al., Nat Comm 9 (2018) 3563.

4 Loubeyre, P., Occelli, F. & Dumas, P., Nature 577 (2020) 631-635.

5 Eremets, M. I., Drozdov, A. P., Kong, P. P. & Wang, H., Nature Physics 15 (2019) 1246-1249.

6Loubeyre, P., Occelli, F. & Dumas, P., Physical Review Letters 129 (2022) 035501.

7 Dalladay-Simpson, P., Howie, R. T. & Gregoryanz, E., Nature 529 (2016) 63-67.

8 Ji, C. et al., Nature 573 (2019) 558-562.

9 Ji, C. et al., Nature, In Press (preprint: https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-5080559/v1).

金刚石的高压研究及压力标定

<u>李冰</u>、吉诚、胡清扬、毛河光

北京高压科学研究中心 上海前瞻物质科学研究院

Email: libing@hpstar.ac.cn

摘要:

金刚石是碳元素的一种固态形式,具有立方金刚石结构。它拥有诸多优良特性,应用广泛,受到大量的研究关注。作为天然最坚硬的材料,金刚石还具有最高的可压缩性,并被用作产生极端高压的压砧。 然而在静高压下高达百万大气压以上,对其本身物性的研究却并不完整[1-3],尤其是在超高压准静水压 力下,缺少相关研究。进行此类测量的困难如下:首先,在超高压力下,两个压砧之间的距离非常有限, 小于~5 微米,因此样品腔的空间较小。尤其是要求传压介质(如氦或気)的引入,进一步压缩了样品 空间:其次,作为一种低原子序参数的材料,其 X 射线衍射强度较低,对探测和样品准备提出更高要 求。此外,由于样品腔很小,对空间分辨率提出了更高的要求,用以区分横向上样品和其它物质、以及 纵向上样品与压砧信号的区分。最后,由于金刚石样品非常坚硬,一旦划伤或桥架两个压砧台面,会造 成压砧过早破碎,妨碍在超高压力下的实验研究。利用微聚焦同步辐射 X 射线实现了微小金刚石样品 在超高压力下的单晶 X 射线衍射实验;同时利用微区拉曼光谱仪测量了其在准静水压力下的拉曼光 谱。此研究结果拓展了对金刚石在准静水压超高压下稳定性和晶格振动的理解。此外,结合近期的理论 和实验方面的进展[4,5],尝试建立了基于金刚石的压力标定,为超高压下的压力标定提供了新的思路。

关键词: 超高压, 金刚石, 压力标定

参考文献:

- [1] M. Hanfland, K. Syassen, S. Fahy, S. G. Louie, and M. L. Cohen, Phys. Rev. B 31, 6896 (1985).
- [2] F. Occelli, P. Loubeyre, and R. Letoullec, Nat. Mater. 2, 151 (2003).
- [3] N. Dubrovinskaia, L. Dubrovinsky, R. Caracas, and M. Hanfland, Appl. Phys. Lett. 97, 251903 (2010).
- [4] Q. Hu and H.-k. Mao, Matter and Radiation at Extremes 6, 068403 (2021).
- [5] Q. Hu, B. Li, X. Gao, Y. Bi, L. Su, and H.-k. Mao, Proceedings of the National Academy of Sciences **118**, e2118490118 (2021).

17

新型光功能材料的压致构效调控及响应机理研究

<u>李茜</u>

聊城大学物理科学与信息工程学院 Email: liqian@lcu.edu.cn

光功能材料是一类在外场作用下利用自身光学性质变化实现光信号探测与调制的先进功能材料,在 光电器件、信息存储与传感领域展现出重要的应用前景和研究价值。近年来,报告人聚焦光功能材料物 理前沿研究领域,通过高压物理手段精准调控材料晶体结构、电子结构,构建材料结构一性质关系,探 索材料新功能、新物态,揭示光物理过程及响应机理,为开发高效光功能材料提供科学依据¹⁶。首先, 我们设计并制备了系列金属卤素钙钛矿,基于不同的结构维度与结构特性,利用压力诱导光敏基元构象 畸变,实现材料宏观光学性能的显著调控,极大地拓展其光学功能。例如,通过压力调控并优化材料带 隙性质,阐明压致变色微观机制,为新型光伏材料的设计与可控制备提供科学依据。提出高压调控材料 结构、激子行为新策略,阐明压致荧光增强与优化的物理本质,建立获得高效发光材料新方法等。此外, 基于金属卤素钙钛矿的研究成果,进一步开展智能有机发光分子和低维纳米材料的新奇结构、性质响应 研究。通过高压改变分子间相互作用与精细结构,发现了系列独特的压力响应行为,为开发新型力敏智 能材料提供了重要的科学思路和技术途径。

关键词:金属卤素钙钛矿,金属卤化簇,有机发光材料,力敏智能发光参考文献

- Yanan Wang, Yayun Wang, Lin Wei, Aisen Li, Yuanyuan Fang, Lei Li,* Qian Li,* Kai Wang,* Developing Multifunctional Luminophore of Deferasirox Molecule with Excitation-Sensitive Mechanofluorochromic Properties. *Chem. Eng. J.* 2025, 507, 160849.
- Yayun Wang, Zuping Xiong, Yanan Wang, Aisen Li, Yuanyuan Fang, Lei Li, Kai Wang,* Qian Li,* Haoke Zhang,* Pressure-Engineered Through-Space Conjugation for Precise Control of Clusteroluminescence. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 64, e202420502.
- Lin Wei, Zhaojiang You, Xinmiao Meng, Yuanyuan Fang, Aisen Li, Shourui Li,* Kai Wang, * Qian Li,* High-Pressure Exciton Engineering in Two-Dimensional Metal Halide Perovskite toward Intense Deep-Blue Emission and Regulated Photocurrent Property. *Appl. Phys. Lett.* 2024, *125*, 211901.
- Qian Li, Bin Xu, Zewei Quan,* Pressure-Regulated Excitonic Transitions in Emergent Metal Halides. Acc. Chem. Res. 2023, 56, 3282.
- Qian Li, Zhongwei Chen, Mingze Li, Bin Xu, Jiang Han, Zhishan Luo, Li Tan, Zhiguo Xia,* Zewei Quan,* Pressure-Engineered Photoluminescence Tuning in Zero-Dimensional Lead Bromide Trimer Clusters. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 2583.
- Qian Li, Zhongwei Chen, Bo Yang, Li Tan, Bin Xu, Jiang Han, Yusheng Zhao, Jiang Tang, Zewei Quan,* Pressure-Induced Remarkable Enhancement of Self-Trapped Exciton Emission in One-Dimensional CsCu₂I₃ with Tetrahedral Units. *J. Am. Chem. Soc.* 2020, *142*, 1786.

High-Pressure Non-Equilibrium structures and Physical Properties

Chuanlong Lin

Center for High Pressure Science & Technology Advanced Research (HPSTAR), China Email: chuanlong.lin@hpstar.ac.cn

Abstract: Changes in crystal structure and material properties are widespread in nature, with nearly all materials undergoing phase transitions when subjected to changes in pressure or temperature. This phenomenon is a significant research subject across multiple disciplines, including condensed matter physics, geoscience, materials science, and chemistry. In high-pressure scientific experiments, the rate of pressure change over time varies depending on the loading method, ranging from nanosecond timescales in shock wave experiments, to millisecond and microsecond scales in rapid loading experiments, and even to minutes or longer in diamond anvil cell (DAC) experiments. This diversity in compression timescales implies that pressure-induced phase transitions and changes of physical properties may exhibit distinct non-equilibrium behaviors across different timescales. The structural evolution pathways and mechanisms of materials transforming from one equilibrium state to another can vary significantly depending on the timescale. Under non-equilibrium conditions, materials may exhibit unique physical phenomena and possess potential application value.

This report focuses on transition kinetics and mechanoluminescent materials as examples to introduce how our research group utilizes time-resolved probe and rapid loading techniques to study the kinetics of structural phase transitions and the evolution of material properties under high pressure on different time scales. Through these studies, we reveal the unique dynamic response mechanisms of materials under high-pressure non-equilibrium states across different timescales.

References:

- 10. Mei Li*, Xuqiang Liu, Sheng Jiang, Jesse S. Smith, Lihua Wang, Shang Peng, Yongjin Chen, Yu Gong, **Chuanlong Lin***, Wenge Yang, Ho-Kwang Mao, Formation of distinctive nanostructured metastable polymorphs mediated by kinetic transition pathways in germanium, *Matter Radiat. Extremes* 10, 037801(2025).
- Xiaohui Chen, Yi Zhang, Lei Liu, Shijia Ye, Shourui Li, Qiumin Jing, Junjie Gao, Jun Li*, Qiang Wu*, Hao Wang and Chuanlong Lin, <u>Kinetic control of high pressure phase transitions in anatase TiO₂</u>, *Phys. Rev. B* 111(10), 104108(2025).
- Tingting Zhao, Hao Wang, Jiayue Jiang, Mei Li, Junlong Li, Ke Liu, Shang Peng, Bohao Zhao, Yanlong Chen, Jiao An, Yanchun Li, Sheng Jiang*, and Chuanlong Lin*, <u>Rate-Dependent Mechanoluminescence in SrZn₂S₂O: Mn²⁺ for Time-Characterized Optoelectronic Devices</u>, *J. Phys. Chem. C* 129, 4715-4723(2025).
- 7. Hao Wang, Tingting Zhao, Mei Li, Junlong Li, Ke Liu, Shang Peng, Xuqiang Liu, Bohao Zhao, Yanlong Chen, Jiao An, Xiaohui Chen, Sheng Jiang, Chuanlong Lin*, and Wenge Yang, <u>Oscillatory mechanoluminescence of Mn²⁺-doped SrZnOS in dynamic response to rapid compression</u>, *Nature Communications* 16, 548(2025).
- 6. Hao Wang, Tingting Zhao, Mei Li, Junlong Li, Shang Peng, Xuqiang Liu, Bohao Zhao, Yanlong Chen, Chuanlong Lin*, <u>High-pressure phase transition kinetics and physical properties on second-to-microsecond time scales: Review</u>, <u>Progress, and prospects</u>, *Chinese Journal of High Pressure Physics* 38: 030101(2024).
- 5. Hao Wang, Xiaohui Chen, Junlong Li, Mei Li, Ke Liu, Dongliang Yang, Shang Peng, Tingting Zhao, Bohao Zhao, Yanchun Li*, Yonggang Wang*, Chuanlong Lin*, and Wenge Yang, <u>Pressure- and Rate-Dependent Mechanoluminescence with Maximized Efficiency and Tunable Wavelength in ZnS: Mn²⁺, Eu³⁺, ACS Applied Materials & Interfaces, 15, 28204-28214(2023).</u>
- 4. Bihan Wang, Bing Li, Xuqiang Liu, Hao Wang, Sheng Jiang*, **Chuanlong Lin***, Wenge Yang, <u>Millisecond time-resolved synchrotron radiation X-ray diffraction and high pressure rapid compression device and its application.</u> Acta Phys. Sin. 71, 100702 (2022).
- 3. Chuanlong Lin, and John S. Tse*, <u>High-pressure nonequilibrium dynamics on second-to-microsecond time scale:</u> <u>Application of time-resolved x-ray diffraction and dynamic compression in ice</u>. J. Phys. Chem. Lett. 12, 8024-8038 (2021).
- Chuanlong Lin*, Xuqiang Liu, Dongliang Yang, Xiaodong Li, Jesse S. Smith, Bihan Wang, Haini Dong, Shourui Li, Wenge Yang, and John S. Tse, <u>Temperature- and Rate-Dependent Pathways in Formation of Metastable Silicon</u> <u>Phases under Rapid Decompression</u>, *Phys. Rev. Lett.*, 125, 155702(2020).
- 1. Chuanlong Lin, Xuqiang Liu, Xueyong, John S. Tse*, Jesse S. Smith, Niall J. English, Bihan Wang, Mei Li, Wenge Yang*, and Ho-Kwang Mao, <u>Temperature-dependent kinetic pathways featuring distinctive thermal-activation</u> mechanism in structural evolution of ice VII, *PNAS*, 117(27), 15437-15442(2020).

压力对 Co₃TeO₆结构和带隙的调控研究

柳雷

中国工程物理研究院流体物理研究所,四川绵阳 621900 Email: lei.liu@caep.cn

摘要:

双钙钛矿体系是一系列重要的多功能材料,在很多领域都有重要的应用前景,比如太阳能领域。但 是作为太阳能电池的吸光材料,很多双钙钛矿材料的带隙都过大,需要找到一种有效的方法来调控其带 隙。本研究以多铁性氧化物 Co₃TeO₆为研究对象,发现将 Co₃TeO₆加载到 55 GPa 后再卸载到常压,其 带隙从最初的 2.93 eV 减小到 1.85 eV,减小了~37%。在此期间,样品的颜色发生了显著的变化,呈现出 明显的压致变色现象(见图 1)。经过高压处理的 Co₃TeO₆的窄带隙相可在常温常压条件下稳定存在至少 数月的时间,证明 Co₃TeO₆可作为一种有效且稳定的太阳能吸光材料。为了弄清 Co₃TeO₆ 带隙减小背 后的微观机理,我们利用原位的同步辐射高压 X 射线衍射技术和拉曼散射技术,系统研究了 Co₃TeO₆ 的晶体结构在加卸载过程中的变化。结果显示,在加压过程中,Co₃TeO₆发生了两次结构相变,从单斜 相(空间群 C2/c)转变为正交相(空间群 Pmmm)再转变第二个单斜相(空间群 P2/m)。但是在卸压过程中, 高压的 P2/m 相并未回到 Pmmm 相或 C2/c 相,而是一直存在于卸压的整个过程,直到卸载到常压环境。 通过对比各晶体结构的特征,我们认为,BO₆ 八面体连接维度的降低(从共面和共边降低为共顶点)以及 Co-O-Co 键长的减小导致 Co 和 O 波函数重叠度的增加,是 Co₃TeO₆带隙减小的微观原因。本项研究证 明高压是一种绿色且有效的调控材料带隙的方法,并为后续搜寻环境友好的太阳能电池吸光材料提供了 指导。



图 1. Co₃TeO₆ 的压致变色效应及其带隙随压力的变化 关键词:带隙、相变、双钙钛矿

高压驱动材料设计:结构和性能关系的定量解析

吕旭杰

北京高压科学研究中心(上海) Email: xujie.lu@hpstar.ac.cn

摘要:

近年来,高压能够显著改变材料的原子排列和电子结构,从而诱导出常压下难以实现的新奇物态与 性能,例如超导、超硬等特性,高压这一独特调控维度为结构化学和材料化学的前沿研究提供了新的机 遇。结合高压调控过程的原位表征技术,使定量解析材料的结构-物性关系成为可能。定量解析的核心 在于建立多尺度关联模型,揭示压力诱导的结构畸变、键合重构等微观参量与宏观性能(如发光效率、 导电性)的关联机制。本报告中我们以金属卤化物光电材料为例,利用高压调控结合同步辐射等原位结 构物性表征的方法,系统研究其在高压下的结构畸变和载流子特性等的调控规律,及其与光电性能之间 的关联机制。通过逐步解析结构-物性关系,我们建立了可用于指导材料设计的新结构表达因子,并据 此设计制备了高性能新材料。
金属卤化物中声子调控激发态动力学的高压光谱研究

<u>隋来志</u>

中国科学院大连化学物理研究所,大连,116023 Email: lzsui@dicp.ac.cn

摘要:

金属卤化物因其优异的光电性能、结构可调性和丰富的激发态物理过程,近年来成为光功能材料研 究的核心体系之一。在此类材料中,声子不仅调节激发态的能量弛豫和复合动力学,还通过电子-声子 耦合、自陷激子形成、非简谐振动等机制深度参与其光电响应过程。因此,系统阐明声子在激发态动力 学与光谱行为中的作用,对于构建材料性能调控策略和理解其光物理本征机制具有重要意义。本研究围 绕金属卤化物中声子与激发态相互作用的核心问题,引入高压手段对晶格结构与电子态进行调控,结合 超快光谱技术,从多维尺度探讨声子在激发态形成、能量转移与光谱响应中的关键作用。高压不仅提供 了精细调节晶格畸变与耦合强度的手段,还显著影响了自陷激子稳定性与上转换发光效率。通过对发光 过程中的寿命变化、高阶声子散射特征及热敏响应的分析,揭示了声子在辐射与非辐射过程中的耦合路 径,证实其在自陷激子行为、能量转换及温度感知等典型现象中的物理贡献。本报告建立了声子调控激 发态动力学与光电特性之间的联系,强调了高压环境在揭示光谱响应机制中的独特作用,为新型光功能 材料的设计提供了理论基础和谱学支持。



关键词:金属卤化物;声子效应;激发态动力学;相干声子 参考文献

[1] Jiang J., Niu G., Wang X., et al. Adv. Funct. Mater., 2024, 34(13): 2312316

[2] Niu G., Jiang J., Zeng X., et al. Angew. Chem. Int. Ed., 2025, e202422424

Progress in approaching room temperature superconductivity in hydrides

<u>Viktor Struzhkin</u>^{1,2}, Dmitrii Semenok³, Di Zhou³, Ivan Troyan⁴, Ho-kwang Mao^{1,2,3}

¹Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research (HPSTAR), Shanghai

²Shanghai Key Laboratory of Material Frontiers Research in Extreme Environments (MFree), Shanghai Advanced Research in Physical Sciences (SHARPS), Pudong, Shanghai 201203, China

³Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research (HPSTAR), Beijing

⁴Shubnikov Institute of Crystallography, RAS, Moscow

Recent reports of nearly room temperature superconductivity in new hydride ("superhydride") materials have attracted significant attention recently, but also have raised critical comments regarding Meissner effect evidence of the superconductivity in these systems. The experimental evidence of high T_c values in superhydrides is derived mostly from resistivity studies under very high pressure. In our report we present an overview of the Meissner effect studies in this new family of superconductors, as well as critical considerations of the technique in the literature. We will also present our measurements of magnetic susceptibility by improved techniques in several superconducting superhydrides, including LaHx (x~12) with Tc near 270 K.

Pb/MnSe₈Te₁₋₈中高压相的光导-超导耦合机理与截获研究

王培、韩东轩、彭帝、赵静、王贤龙

中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所 Email: pwang@issp.ac.cn

兼具负光导和超导性能的材料在光电探测和量子计算领域具有广阔的应用前景。然而,两种性能的 共存依赖于高压相,导致其耦合机制不明确,限制了应用。因此亟需截取高压相至常压,深入揭示其性 能耦合机制与截获原理,推动其在光电领域实际应用。铅(锰)基硫族化合物具有对压力和掺杂高度敏感 的自旋-轨道耦合,通过高压掺杂可调控其相变势和光电性能。据此,我们通过自主搭建的原位高压光 电输运测量装置往复调制 Pb/MnSeo.5Teo.5 的晶体和电子结构,观察到了超导-负光导-晶格耦合现象,在 近常压截获了兼具超导和负光导的高压相。研究发现 PbSeo.5Teo.5 在高压下经历了 Pb-6s² 孤对电子重构 诱发的结构相变(图 1)。在~18 GPa,具有结构依赖性的超导和负光导耦合,卸压中增强的超导保存到 5 GPa (*T*c~ 6.9 K)。DFT 计算发现费米面附近增强的 *p-p* 杂化和光热效应增强了电-声相互作用,引发库珀 对的形成和载流子浓度降低,导致超导和负光导的耦合,且二者在光照/低温刺激下可实现转换。



图 1 PbSe0.5 Te0.5 的超导、正光导(PPC) -负光导(NPC)转变、晶体结构演化相图和载流子浓度随压力演化

图谱及其光电-晶格耦合机制示意图。

关键词:负光导,超导,高压,硫族化合物 参考文献

- Dongxuan Han,... Pei Wang* et al., Concurrent Pressure-Induced Superconductivity and Photoconductivity Transitions in PbSe_{0.5}Te_{0.5}. Advanced Materials 37, 2417597 (2025).
- Pei Wang* et al., Concurrent Pressure-Induced Spin-State Transitions and Jahn-Teller Distortions in MnTe. Chemistry of Materials. 34, 3931-3940 (2022)
- L. Deng et al., Creation, stabilization, and investigation at ambient pressure of pressure-induced superconductivity in Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te₃. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 122, e2423102122 (2025)

高压下硅酸盐熔体的弹性波速、密度及状态方程

<u>许满^{1,2}</u>、景志成³、James Van Orman⁴、Tony Yu⁵、Yanbin Wang⁵

1上海前瞻物质科学研究院
 2北京高压科学研究中心(上海分中心)
 3南方科技大学地球与空间科学系
 4凯斯西储大学地球、环境与行星科学系
 5芝加哥大学先进辐射源中心
 Email: man.xu@hpstar.ac.cn

摘要:

硅酸盐熔体是地球内部物质与能量运移的主要媒介,显著影响着地球的结构、成分及物理化学性质。 地震观测结果表明,在地球内部上地幔软流圈及地幔过渡带之上存在显著的地震波低速异常区,暗示着 熔体层的存在。然而,熔体能否稳定存在于这些区域并合理解释地震观测数据取决于熔体的密度和弹性 波速等物理性质。由于熔体具有易反应、易流动、结构复杂等特性,给实验造成了极大的挑战,因此熔 体在高压下的波速、密度及状态方程仍没有得到很好的制约。前人的研究主要将硅酸盐玻璃作为熔体的 类似物,通过对玻璃物性的测量而推测熔体在高压下的性质。然而,玻璃的物性数据是否能直接用于熔 体物性的推断仍缺乏实验验证。本研究运用先进的大腔体压机原位超声测量技术和高压 X 射线断层显 微成像技术对硅酸盐熔体的波速、密度及状态方程进行了测定,主要包含 CaO-MgO-FeO-SiO₂ 和 Na₂O-Al₂O₃-SiO₂熔体体系。实验获得的熔体数据与玻璃数据对比,揭示了硅酸盐玻璃并不适合作为研 充熔体高压物性的类似物。实验结果对理解硅酸盐熔体在地球内部的重力稳定性及深部熔体的地震学特 征具有重要意义。

关键词: 硅酸盐熔体、弹性波速、状态方程、高温高压、地球内部低速区

25

微结构材料力学性质的时空分辨布里渊散射光谱成像技术研究

杨林、母健、杨延强

中国工程物理研究院流体物理研究所 冲击波与爆轰物理全国重点实验室 Email: yqyang@caep.cn

摘要: PBX 炸药的安全性及爆轰性能与其微结构直接相关。应力波作为能量载体在输运演化过程中受 到微结构的调控,其物理起源在于炸药晶粒与粘结剂弹性模量空间分布不均匀性导致能量的空间局域化 效应,因而有必要进行应力波的显微时空分辨输运规律的实验研究。本报告将介绍稳态及时间分辨布里 渊散射光谱技术在材料宏观力学性能定征方面的应用,包括弹性的显微空间分辨成像,以及应力波输运 过程的时空分辨成像,特别是冲击波 Hugoniot 关系的实验测量技术,并讨论微/介/宏能量输运过程的 跨尺度计算模拟解决方案。



图 1 激光驱动冲击波输运过程的瞬态显微成像

关键词:微结构,布里渊散射光谱,弹性模量,激光激波

High-Pressure Studies of Graphene Nanodevices and 2D Magnetic Materials using Advanced Quantum Sensing and Transport Techniques

王宇鹏1、麦棣1、叶春晖1、仲成1、张增明2*

¹中国科学技术大学物理系 ²中国科学技术大学物理实验教学中心 Email: zzm@ustc.edu.cn

摘要:

We utilize extreme hydrostatic pressure to investigate and manipulate quantum phenomena in graphene-based nanodevices and 2D magnetic material devices. Our work leverages advanced nitrogen-vacancy (NV) center quantum sensing, enabling in-situ, high-resolution mapping of local electromagnetic fields within graphene devices, and precise characterization of magnetic order evolution in many other 2D systems under pressure. Applying these high-pressure methodologies to graphene Moiré superlattices, we demonstrate the tuning of moiré potentials to induce significant band structure alterations, such as the opening of a tertiary gap in graphene/h-BN moiré superlattices, and the dynamic compression of flat bands in twisted bilayer graphene superlattices. Our integrated approach, combining cutting-edge quantum sensing and quantum transport with extreme pressure environments, powerfully drives materials towards new electronic and structural phases, uncovering novel functionalities in advanced 2D systems.

Pressure-Driven Electronic and Structural Transitions in Emerging Optoelectronic Materials

Saqib Rahman

In this talk, I will present our recent findings on pressure-driven electronic and structural transitions in emerging optoelectronic materials. Specifically, I will highlight novel investigations across three distinct classes of materials: HfS₃ (a transition metal trichalcogenide), WO₃ (a metal oxide), and CsMnCl₄ (a halide perovskite), using a combination of in-situ Raman spectroscopy, photoluminescence (PL), photocurrent measurements, and synchrotron-based X-ray diffraction. In HfS₃, we observed a significant enhancement in photocurrent under pressure and the formation of a super-metastable phase upon decompression. In WO₃, pressure-induced structural transitions were correlated with substantial modulation in photoconductivity. Notably, we identified the emergence of oscillatory photoresponse behavior, which we attribute to pressure-induced structural distortions, electron–phonon interactions, and polaron formation. Furthermore, I will discuss our high-pressure investigation of CsMnCl₄, where structural and optoelectronic properties were studied up to 55 GPa at room temperature. Within a moderate pressure range, we achieved remarkable photoluminescence enhancement and bandgap narrowing, emphasizing the tunability of this material system under extreme conditions.

B-N-H 化合物中双氢键的高压研究

<u>齐广宇</u>

中国工程物理研究院化工材料研究所 Email: qiguangyu@caep.cn

作为富氢材料,B-N-H 化合物具有较高的含氢量,可用作化学储氢材料以及推进剂的重要组分。 B-N-H 化合物中广泛地存在着一种分子间弱相互作用——双氢键,它在 B-N-H 化合物的晶体结构当中 起到了至关重要的作用。而且双氢键中 H[&]和 H^{&+}之间的电荷转移,将导致加热过程中 B-N-H 化合物的 产氢。压力能够有效地减小分子间距离,增强分子间弱相互作用,是研究分子间弱相互作用的理想工具。 高压下某些分子间弱相互作用(如氢键、范德华力)甚至会发生扭曲和重排,导致相变发生。对 B-N-H 化合物中的双氢键进行高压研究,对认识由双氢键构成的晶体材料的物理、化学性质具有重要的科学意 义。更为重要的是高压下双氢键的增强和新双氢键的形成均有利于氢的释放。因此研究 B-N-H 化合物 中双氢键在高压下的演化可为 B-N-H 富氢材料的使用提供新思路。我们对 B-N-H 化合物中的双氢键进 行了较为系统的高压研究。压力能够显著影响双氢键,导致 B-N-H 化合物晶体结构的改变,也可以为弱 C—H…H—B 双氢键提供实验证据。并且压力将导致双氢键作用的增强,能够改变 B-N-H 富氢材料的 分解路径,优化放氢反应。





关键词: B-N-H 化合物,双氢键,金刚石对顶砧,高压 参考文献

- Qi, G.; Wang, K.; Li, X.; Zou, B., High Pressure Behavior of Hydrogen Storage Material Guanidinium Borohydride. J. Phys. Chem. C 2016, 120, 13414-13420.
- Qi, G. Y.; Wang, K.; Yang, K.; Zou, B. Pressure-Induced Phase Transition of Hydrogen Storage Material Hydrazine Bisborane: Evolution of Dihydrogen Bonds. J. Phys. Chem. C 2016, 120, 21293-21298.
- Qi, G. Y.; Wang, K.; Xiao, G. J.; Zou, B. High Pressure, a Protocol to Identify the Weak Dihydrogen Bonds: Experimental Evidence of C-H…H-B Interaction. Sci. China Chem. 2018, 61, 276-280.
- Sheng, L. B.; Qi, G. Y.; Jin, K. X.; Chen, A. K.; Huang, X. L.; Liu, G. T.; Zhou, M.; Wang, H. B.; Li, Y.; Wang, K.; Sui, Y. M.; Zou, B. Pressure Strategy to Improve H Atomic Utilization via Optimized Decomposition Pathway in Solid Hydrazine Borane. J. Phys. Chem. Lett. 2024, 15, 9939-9944.

中子散射研究物质高压下的局域结构与反常性质

<u>蔡冠群</u>、Anthony E. Phillips、Martin T. Dove

四川大学 原子与分子物理研究所 Email: guanqun_cai@scu.edu.cn

摘要:

极端高压环境为材料物性调控提供了独特而有效的手段。近年研究表明,通过高压调控物质的局域 结构,可以诱导出负热膨胀、压力软化等常压下罕见的反常物性。这些现象与高压下材料局域结构的动 态演化存在本质关联。中子散射技术具有独特优势:其与原子核的直接相互作用机制,使得散射长度与 原子序数无直接相关性,因此对轻元素(如氢、氧)和重元素的空间定位具有同等解析精度。特别是中 子特有的准弹性散射技术,可追踪氢原子动态行为,为解析高压局域结构演变提供独特视角。本报告将 聚焦典型负热膨胀材料 ScF₃和(NH₄)₂SO₄等体系,结合高压中子衍射、准弹性散射等实验方法,系统阐 述高压局域结构调控与宏观物性的内在关联,揭示晶格非谐振动、氢键网络重构等微观机制对宏观反常 物性的决定性作用。



图 1 (a) ScF3 晶体结构以及不同温度、压强下的体积变化。(b) (NH4)2SO4 在 Pna21 低温相和 Pnam 高温相

下的 NH4 取向变化分布。

关键词: 高压相变、局域结构、中子散射 参考文献

- 1. Wei Z, Tan L, Cai G, et al. Colossal pressure-induced softening in scandium fluoride. Physical Review Letters, 2020, 124(25): 255502.
- 2. Yuan S, Meijer B E, Cai G, et al. Origin of the large entropy change in the molecular caloric and ferroelectric ammonium sulfate[J]. Advanced Functional Materials, 2022, 32(45): 2207717.

针对 CeNiC₂ 原子位置与物性在高压下演化的研究

马翰明

中国科学院物理研究所 Email: mhm@iphy.ac.cn

摘要:

CeNiC₂是一种非中心对称正交晶系重费米子化合物。随着温度降低,该化合物首先在约 20 K 时经 历顺磁态到非共线反铁磁态(ICAF)的转变,随后在 10 K 时形成共线反铁磁有序(CAF),最终在 2 K 附近转变为铁磁有序(FM)^[1]。研究表明,当施加压力至 11GPa 时,CeNiC₂会进入超导态,其超导转 变温度约为 3.5 K^[2],为铈基重费米子超导体中最高值。值得注意的是,该材料的上临界场(约 20 T) 显著超越泡利顺磁极限(约 6.5 T),暗示其超导态本质具有非常规特性^[1]。针对 CeNiC₂ 的多晶样品研 究指出,在其进入超导态时 ICAF 被完全压制,并且电阻出现非费米液体行为,说明在 11GPa 处存在量 子临界点。另外,理论上推测该材料的超导机制可能源自自旋单态与自旋三重态共存的特殊库珀对组合 态。

然而目前针对 CeNiC₂的研究主要基于多晶样品,难以对其各向异性进行探究。然而在研究量子涨落 行为时,各向异性是一个非常重要的研究参数。所以本研究通过丘克拉斯基晶体提拉法制备 CeNiC2 单 晶,并系统测量了压力下 CeNiC₂原子位置以及电阻率p的演化规律。实验结果显示: CeNiC₂在超导态 下仍保持非中心对称晶体结构,以及在 7GPa 处发生 Ce-Ce 最近邻方向变化^[3]。

在常压条件下, CeNiC₂单晶的输运和磁学性质均呈现显著各向异性。与磁化易轴(a轴)对应的电阻 率 $\rho(T)$ 最低,而沿磁化难轴(b轴)方向则呈现最大值。值得注意的是,这种电阻率的各向异性行为在 超导转变温度达到峰值对应的临界压力下依然存在。在临界压力下,各轴方向的 $\rho(T)$ 在 10 K 以下均呈 现线性温度依赖关系($\rho \sim T^1$),这与价态涨落带来的量子临界行为非常一致。

关键词: 高压, 原子位置, 重费米子, 超导

参考文献

[2] S. Katano et.al., Phys. Rev. B. 99, 100501(R) (2019)

[3] Hanming Ma et.al., Phys. Rev. B. 108, 064435 (2023)

^[1] A. Bhattacharyya et.al., Phys. Rev. B. 90, 054405 (2014)

Time and Temperature as Internal Pressure Parameters for Tailoring the Magnetic Functional Properties of Manganites

Danyang Su¹, <u>N.A. Liedienov^{1,2}</u>

¹State Key Laboratory of High Pressure and Superhard Materials, Jilin University, 130012 Changchun, China ²Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine

Email: sudy22@mails.edu.jlu.cn; nikita.ledenev.ssp@gmail.com

Abstract: Aging time (*t*) is a commonly underestimated physical parameter, yet it can dramatically affect the functional properties of materials after prolonged durations. In contrast, annealing temperature (t_{ann}) can more rapidly alter the structural and size characteristics of compounds. Both *t* and t_{ann} are internal, irreversible parameters. However, hydrostatic pressure (*P*) represents another key external, reversible parameter. Understanding the effects of these parameters on the functional properties of manganite nanoparticles is critical from both fundamental and applied perspectives. Therefore, we investigated the influence of annealing temperature (t_{ann}) and aging time (*t*) in terms of pressure, and additionally external hydrostatic pressure (*P*) on phase transition temperatures—including the paramagnetic Curie temperature (θ), Curie temperature (T_c), and blocking temperature (T_B)— as well as the magnetocaloric effect of the La_{0.8-x}Cd_xNa_{0.2}MnO₃ nanopowders.



Fig. 1. Evolution of the Curie temperature derivative dT_C/dP with respect to internal irreversible (t_{ann} and t) and reversible external (P) pressures for the La_{0.8}Na_{0.2}MnO₃ (LNMO) and La_{0.75}Cd_{0.05}Na_{0.2}MnO₃ (LCNMO). Keywords: Manganites; Nanoparticles; Aging time; High pressure; Phase transitions; Magnetocaloric effect

高压下碱/碱土金属硼化物的结构设计及物性研究

刘云仙、刘晓兵

曲阜师范大学物理工程学院 Email: yunxianliu@qfnu.edu.cn

摘要:

金属硼化物因其复杂的化学键合特性和丰富的结构多样性,展现出超导与超硬性能协同优化的独特潜力,已成为多功能材料研究的重要方向。近年来,过渡金属硼化物(如 ReB₂、ZrB₁₂等)因其高硬度(~48 GPa)与优异导电性(甚至超导,如 ZrB₁₂的 *T_c*~6 K)成为研究热点,但这些材料通常需要高压合成(>5 GPa),且可制备尺寸受限(毫米级),严重阻碍了实际应用[1-7]。因此,如何在降低合成压力的同时,实现大尺寸、高导电性甚至超导超硬材料的设计与制备,成为该领域亟待解决的关键科学问题。

碱及碱土金属(AM)相对于过渡金属而言,化学活性高,与硼结合反应强,倾向于在更低的压力下形成更多化学计量比的碱及碱土金属硼化物(AMB)。2022年,我们团队成功制备了 NaB4,制备条件为 1.5 GPa 和 1000 K,其硬度高达 26 GPa,可以和 TMB 相媲美[8-10]。且当除去部分 Na 后,其由一个导电性很好的金属转变为超导体。因此,我们致力于在 AMB 化合物中寻找和设计兼具超导-超硬多功能材料。

我们在 CaB₇ 中预测了一个硼基包合物结构,含有 B₂₃笼。这也是第一次在碱金属、碱土金属硼化物中发现的包合物。在常压下,CaB₇表现出超导电性和高硬度($T_c \sim 7.7$ K, $H_v \sim 20.4$ GPa),是一种超导硬质材料。金属原子的原子半径和 Pauling 电负性对 B₂₃包合物结构的稳定以及超导电性和硬度的微调都起着关键作用。在此基础上,我们发现了一系列与 CaB₇结构同构的新型硼化物 AMB₇ (AM = Li, Na, K, Mg 和 Sr),在常压下它们表现出较高的硬度和超导电性。

设计了一种"Waffle-like"的 CaB₁₂。值得注意的是, Waffle-CaB₁₂是一种金属超硬材料, H_v 高达 50.1 GPa, 是当时已知金属十二硼化物中硬度最高值,也是 AMB 体系中的最高值。此外,通过电子调控,我们得到了超导超硬材料 Ca₂KB₃₆ ($T_c \sim 16.9$ K, $H_v \sim 44.1$ GPa)。此项工作为超导-超硬多功能材料的设计提供了新思路。

关键词: 高压, 金属硼化物, 硬度, 超导电性

References:

1. H. Y. Chung, M. B. Weinberger, J. B. Levine, A. Kavner, J. M. Yang, S. H. Tolbert, R. B. Kaner, Science 2007, 316, 436.

2. R. W. Cumberland, M. B. Weinberger, J. J. Gilman, S. M. Clark, S. H. Tolbert, R. B. Kaner, J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 7264.

3. X. Q. Chen, C. L. Fu, M. Krcmar, G. S. Painter, Phys. Rev. Lett. 2008, 100, 196403.

4. T. Ma, H. Li, X. Zheng, S. Wang, X. Wang, H. Zhao, S. Han, J. Liu, R. Zhang, P. Zhu, Y. Long, J. Cheng, Y. Ma, Y. Zhao, C. Jin, X. Yu, Adv. Mater. 2017, 29, 1604003.

H. Tang, X. Gao, J. Zhang, B. Gao, W. Zhou, B. Yan, X. Li, Q. Zhang, S. Peng, D. Huang, L. Zhang, X. Yuan, B. Wan, C. Peng,
 L. Wu, D. Zhang, H. Liu, L. Gu, F. Gao, T. Irifune, R. Ahuja, H. K. Mao, H. Gou, Chem. Mater. 2020, 32, 459.

6. H. Gou, N. Dubrovinskaia, E. Bykova, A. A. Tsirlin, D. Kasinathan, W. Schnelle, A. Richter, M. Merlini, M. Hanfland, A. M.

Abakumov, D. Batuk, G. Van Tendeloo, Y. Nakajima, A. N. Kolmogorov, L. Dubrovinsky, Phys. Rev. Lett. 2013, 111, 157002.

准二维卤化物钙钛矿在高压下的结构和光电性能研究

张华芳、崔虹、程龄莹、毛艳丽

河南大学物理与电子学院 Email: zhf610@163.com

摘要:

近年来,准二维钙钛矿因具有稳定性高、光吸收能力强、电荷载流子扩散长度长等优异的光电特性, 在光电子领域具有广阔的应用前景。然而,由于有机大分子层的插入使其带隙增大,影响了钙钛矿器件 的性能。我们采用高压技术对准二维钙钛矿材料的结构与光电性能进行了研究。研究发现,BA2FASn2I7 的带隙在加压后显著减小(0.108 eV/GPa),在4.0 GPa 时减小到1.34 eV,达到肖克利-奎伊瑟极限 (Shockley-Queisser limit)的最佳带隙值。随着压力进一步增加到4.0 GPa 以上,带隙开始增大。卸压 后,由于结构重结晶,减小的带隙仍然部分保留,且样品的荧光强度和常压相比有大概1.57 倍的提升。 进一步分析表明,在0.0-4.0 GPa 范围内带隙的持续变窄主要是由于样品先后发生了层间压缩和层内压 缩,有效提高了[SnI₆]⁴八面体的变形压力。此外,通过在高压下的原位电学测试中,我们发现钙钛矿 BA2FASn2I7在405 nm、450 nm、980 nm和1532 nm激光下有明显响应,光响应范围扩展到近红外区域。 通过施加压力,我们有效调控了准二维钙钛矿的带隙、增强了光电性能、拓展了响应范围,并为设计性 能更优的材料开辟了一条可选路径。



图 1 (a) 0~4.0 GPa 和(b) 6.4~26.0 GPa 范围内的吸收光谱, (c)不同类型钙钛矿的带隙与压力的关系 关键词: 准二维钙钛矿,高压,光电,带隙

钒酸铋纳米片的高压结构相变

程本源、楼鸿波、曾徵丹、刘轶、曾桥石

中国工程物理研究院上海激光等离子体研究所,上海市嘉定区陈家山路1129号。 Email: chengby@caep.cn

近年来,钒酸铋(BiVO4)材料在光催化领域有着广泛的应用前景¹⁻²,然而其结构与性质的变化规 律一直存在争议³⁻⁴。本文通过对钒酸铋纳米片进行高压原位 XRD、Raman、紫外-可见吸收光谱等研究, 发现其在压致非晶化之前经历了多个中间相,相变路径相比体材料和其他形貌纳米材料更加复杂,这为 人们加深对钒酸盐体系材料的认识,进而探索其在更多领域中的应用前景提供了重要的科学依据。



图1钒酸铋纳米片材料的高压相变示意图

关键词:钒酸铋,纳米片,结构相变。

参考文献

- 1. Fujishima, A.; Honda, K. Electrochemical Photolysis of Water at a Semiconductor Electrode. Nature 1972, 238, 37–38.
- Kudo, A.; Omori, K.; Kato, H. A Novel Aqueous Process for Preparation of Crystal Form-Controlled and Highly Crystalline BiVO₄ Powder from Layered Vanadates at Room Temperature and Its Photocatalytic and Photophysical Properties. J. Am. Chem. Soc.1999, 121, 11459–11467.
- 3. Pellicer-Porres, J.; et al. Phase transition systematics in BiVO₄ by means of high pressure high temperature Raman experiments. Phys. Rev. B 2018, 98, No. 214109.
- 4. Cheng, X.; et al. Pressure-induced structural transformations and new polymorphs in BiVO₄. Phys. Chem. Chem. Phys. 2020, 22, 10238–10246.

高压下 p/π电子调控诱导的反常压致发光响应

翟春光、姚明光、刘冰冰

吉林大学,高压与超硬材料全国重点实验室 Email: zhaicg@jlu.edu.cn

摘要:

反常压致发光响应材料在传感器、光学防伪、发光器件等领域具有重要的应用前景,成为近年来的 研究热点,其中压致蓝移增强材料在深海探测等高色温环境中有重要作用。sp²杂化的碳基分子具有独 特的 p/π电子结构,适合可见光激发,为构筑反常压致发光响应材料提供了重要来源。然而,通常在压 力下分子间相互作用的增强及晶体能隙的减小,使得构筑反常压致发光响应的材料极具挑战。基于此, 我们提出"分子插入""跨环共轭"和"原子轨道共享"等设计思路,构筑出多个反常压致发光响应的 新型功能材料。其中,利用"分子插入",通过高压调制共晶材料中各组分电子结构,构筑了压致荧光 蓝移增强的材料,并进一步推广了该策略。利用"碘原子轨道共享",通过高压调控 1,4-DITFB 分子晶 体中的分子间相互作用,成功构筑了压致从无到有、蓝移增强和寿命延长的室温磷光材料。

关键词: 压致变色材料, 蓝移增强发射, 碳基分子材料

参考文献

- Tongge Xu, Chunguang Zhai*, Ziyao Liu, Xiaoying Yang, Shuhe Hu, Yuchen Shang, Lei Yue, Jiajun Dong, Ran Liu, Quanjun Li, Mingguang Yao*, Bingbing Liu. Room-temperature phosphorescence and anomalous piezochromism in molecular crystals enabled by iodine atomic orbital sharing. Nature Communications 16, 3550 (2025).
- Chunguang Zhai, Xiu Yin, Shifeng Niu, Mingguang Yao*, Shuhe Hu, Jiajun Dong, Yuchen Shang, Zhigang Wang, Quanjun Li, Bertil Sundqvist, Bingbing Liu*. Molecular insertion regulates the donoracceptor interactions in cocrystals for the design of piezochromic luminescent materials. Nature Communications 12, 4084 (2021).
- Tongge Xu, Xiu Yin, Chunguang Zhai*, Desi Chen, Xiaoying Yang, Shuhe Hu, Kuo Hu, Yuchen Shang, Jiajun Dong, Zhen Yao, Quanjun Li, Peng Wang, Ran Liu, Mingguang Yao*, Bingbing Liu. Realizing long range π-conjugation in phenanthrene and phenanthrene-based molecular crystals for anomalous piezoluminescence. Chemical Science 14, 11629 (2023).

压力诱导的 2H-Fe0.33 TaS2 结构相变和磁塌缩

金诚1、王永刚2、朱金龙1,3,4

 物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心, 南方科技大学,深圳 518055

2 材料科学与工程学院,北京大学,北京100871

3 粤港澳大湾区 (广东) 量子科学中心, 深圳 518045

4 新材料重大科学设施研院,南方科技大学,深圳 518055

Email: zhujl@sustech.edu.cn, ygw@pku.edu.cn

摘要:

近年来,过渡金属二硫化物(TMDCs)因其丰富的奇异物理性质而备受关注。这类材料能通过压力和离子插层等外部条件进行便捷调控,成为研究多种奇异物理性质关联性的理想平台。在实际应用中,TMDCs由于其易于解理而成为制作少层器件的理想材料。因此对于这类材料结构及物性的调控以及对二者关联的研究具有相当重大的意义。本研究通过压力和 x=0.33 的铁离子插层调控 2H-TaS2体系。常压下,2H-Fe0.33TaS2 呈现铁磁性伴随着电阻陡降、蝴蝶形双峰磁阻、反常霍尔效应等奇异物性。高压下,2H-Fe0.33TaS2 在~4.0 GPa 和~8.5 GPa 发生两次结构相变,源于层间 Fe-S 键缩短和体积塌缩。其物性在高压下首先在 0.4 GPa 观测到 65 K 的新电阻突降; 2.3 GPa 时当从 300 K 降温其先呈现绝缘体行为,并在 274 K 发生绝缘体-金属转变; 3.7 GPa 时发生磁塌缩,伴随两次电阻陡降、蝴蝶形磁阻双峰及反常霍尔效应的消失,载流子类型由空穴转为电子; 6.4 GPa 时绝缘体-金属转变消失,并且使载流子浓度达到峰值。在 30.1-35.2 GPa 更高压力下,载流子类型重新由电子转为空穴。



图 1 结构相变与物性转变

关键词: 层状过渡金属二硫化物, 高压调控, 磁塌缩

层状磷材料在高压下结构演化的层数依赖性

李辰恺1)、程文静1)、刘影1)2)、朱金龙1)2)3)

 物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心, 南方科技大学,深圳 518055

2) 粤港澳大湾区 (广东) 量子科学中心, 深圳 518045

3) 新材料重大科学设施研院,南方科技大学,深圳 518055

Email: 11910819@mail.sustech.edu.cn

摘要:

近年来, 层状磷材料(黑磷、紫磷等)因其独特以及各向异性和厚度依赖的光电性质吸引了众多关注。黑磷与紫磷在高压下具有相同的相变路径与高压相。特别地,高压层状 A7 相的 ab 面与常压黑磷/ 紫磷相的 ab 面之间均具有一定夹角,黑磷中约为 45 度,紫磷中则几乎为 90 度。值得注意的是,随着 黑磷/紫磷的层数减少, A7 相 ab 面的宽度得到限制,这将导致 A7 相不稳定。基于此,我们利用高压拉 曼光谱系统地研究了黑磷和紫磷高压结构演化的层数依赖性,特别关注了 A7 相的稳定性。首先,黑磷 与紫磷的结构在较薄的样品中更稳定,尤其是在薄层中更加明显。之后,正如预期的那样,随着层数的 减少,高压 A7 相由于尺寸限制而不稳定。具体的,在 3 层及以下的黑磷与 8 层及以下的紫磷中在加压 相变路径中缺少 A7 相,高压下直接相变至简单立方相。值得注意的是,少层磷中的新相变路径可能会 带来新的机遇,例如:在单层和少层黑磷和紫磷中,较高的相变压力可能有助于压力下新性质的出现; 此外,卸压后在低压下保持的简单立方磷可能会保持高压下的物理性质,如金属性或超导性。

关键词: 金刚石对顶砧, 类黑磷, 结构相变, 层数依赖性

38

高压下金属氧族化合物的理论研究

<u>李非</u>、杨国春*

燕山大学理学院 Email: yanggc468@nenu.edu.cn

摘要:

金属氧族化合物在高压下表现出丰富的结构重构与电子态调控效应,其新颖的物性(新奇价态、非常规化学组分、超导电性)为探索量子材料的新机制和功能设计提供了重要平台。 聚焦高压下金属-氧族元素协同作用诱导的奇异电子行为,我们通过第一性原理结构搜索与 电子-声子耦合计算,系统研究了 Ba-Ch (Ch=O/S/Se/Te)^[1]、Re-O^[2]及 Nb-O^[3]体系高压下的 稳定相与物性演化规律,揭示以下两类新奇性质。(1)非常规化学价态:高压诱导 s 区元素 Ba 与 d 区元素 Re 呈现非常规氧化态,其本质源于轨道杂化诱导的电荷重新分配;(2)超导 电性:预言了 *Pnma*-ReO₃ (12K@50 GPa)和 *Pnma*-NbO₂ (18K@50 GPa)的超导电性,并 揭示在 *Pnma*-NbO₂中,Nb 4*d*_{x2-y2}轨道电子与 Nb 一维链剪切振动模式之间的强耦合效应是驱 动超导电性的物理机制。我们的研究为理解金属氧族化合物的高压物性调控规律提供了重要

见解,有效促进了金属氧族化合物的发展。

关键词: 高压; 金属氧族化合物; 化学价态; 电子结构; 第一性原理计算

参考文献

[1] Fei Li, Xiaohua Zhang, Yang Fu, Yanchao Wang,* Aitor Bergara,* and Guochun Yang* J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 4203–4210

[2] Wenjing Li, Fei Li,* Xiaohua Zhang, Jinhui Wu and Guochun Yang* Phys. Chem. Chem. Phys., 2024, 26,13300

[3] Fei Li and Wenjing Li* Phys. Rev. B 2025 (under review)

压力调控 CH₃NH₃PbBr₃钙钛矿量子点中的双激子发射

李海宁1、张海娃1、张鹏1、张国召1,a)、施涵1、王庆林1,a)、李印威2、刘才

龙,^{1,a)}

¹聊城大学物理科学与信息工程学院 ²江苏师范大学物理与电子工程学院 Email: Z2012GZ@163.com; cailong liu@jlu.edu.cn

摘要:

压力诱导的带隙演化、结构相变和激子效应变化等因素能够显著调控卤化铅钙钛矿量子点(QDs)的发光性质。前期研究表明,MAPbBr₃ QDs 作为一种典型的低维卤化铅钙钛矿材料,其在常压下的光致发光(PL)主要归因于光吸收后初始激子的辐射复合,以及由于稳定激子而涉及表面态的激子的辐射复合,而双激子辐射复合是否存在尚不清楚¹⁻³。在本文中⁴,我们通过在常温常压下进行激发强度依赖的稳态 PL 发射和时间分辨荧光(TRPL)光谱测量,以及在变温(80K-260K)常压下的稳态 PL 发射光谱测量,证实了 MAPbBr₃ QDs 的光致发光主要源于双激子辐射复合、激子辐射复合以及涉及表面态的激子辐射复合这三种物理过程的共同作用。通过高压原位的稳态 PL 发射、稳态吸收和 TRPL 光谱测量,我们发现,随着压力诱导的带隙演化和结构相变,MAPbBr₃ QDs 中双激子辐射复合、激子辐射复合、激子辐射复合、激子辐射复合、激子辐射复合、激子辐射复合、激子辐射复合、

关键词:量子点;双激子;光致发光;高压 参考文献

- 1. F. Zhang, H. Zhong, C. Chen, X.-g. Wu, X. Hu, H. Huang, J. Han, B. Zou, and Y. Dong, ACS Nano 9 (4), 4533-4542 (2015).
- Y. Park, A. Jana, C. W. Myung, T. Yoon, G. Lee, C. C. Kocher, G. Ying, V. Osokin, R. A. Taylor, and K. S. Kim, Nano Res. 13, 932-938 (2020).
- P. Tamarat, E. Prin, Y. Berezovska, A. Moskalenko, T. P. T. Nguyen, C. Xia, L. Hou, J.-B. Trebbia, M. Zacharias, L. Pedesseau, C. Katan, M. I. Bodnarchuk, M. V. Kovalenko, J. Even, and B. Lounis, Nat. Commun. 14 (1), 229 (2023).
- 4. H. Li, H. Zhang, P. Zhang, G. Zhang, H. Shi, Q. Wang, Y. Li, and C. Liu, Appl. Phys. Lett. 126 (5) (2025).

高压下镝的结构相变研究

李宏凯、李明豫、邬中炎*、李冰、王贺冲、王邵杰、宋静、杨科、

王霖*, 高国英*, 田永君

燕山大学理学院

Email: hongkaili@stumail.ysu.edu.cn

摘要:

本研究通过同步辐射 X 射线衍射技术,在无传压介质条件下将镝(Dy)压缩至 337 GPa,系统探究了其结构演化与状态方程。实验不仅验证了已知的相变序列 (hP2→hR9→hP4→hR24→oF16),还首次在 195.5 GPa以上发现了从正交面心 oF16(空间 群 Fddd,16原子/晶胞)到 oF8(8原子/晶胞)的等对称相变。oF8 相与轻镧系(Nd-VI¹、 Sm-VI²)和锕系(Am-III、Cm-IV、Cf-III)的高压结构同构,进一步证实了镧系与锕系元 素的结构关联性。

相变过程中,晶格体积连续减小,但沿 b 轴反常膨胀,表现为负线性压缩性(NLC),这是镧系金属中首次在超高压下观测到的现象。结构分析表明,oF8 相的堆垛序列从oF16 的八层(ABCADCBD)简化为四层(ABCD),且 b/c 比值从 1.70(oF16)跃升至 1.76(oF8),表明六方对称性畸变增强。状态方程拟合显示,oF8 相的体弹模量(B₀=131.069 GPa)显著高于 oF16 相(58.813 GPa),表明其更难压缩。

本研究修正了此前理论预测(oF8 相起始压力 275 GPa)⁶,将实验观测提前至 195.5 GPa,为理解重镧系(Gd-Tm)的高压行为提供了新依据。此外,oF8 相的发现揭示了镧系 元素在极端压力下的共性结构特征,为探索 5f/4f 电子关联与几何畸变的相互作用提供了关 键实验证据。未来可通过纳米孪晶金刚石砧等技术拓展至更高压力,以探究可能的后续相 变(如 bcc 相)。

关键词 : 高压相变、镝、负线性压缩性、镧系-锕系关联、同步辐射衍射 参考文献:

[1] S. E. Finnegan, C. V. Storm, E. J. Pace, M. I. McMahon, S. G. MacLeod, E. Plekhanov, N. Bonini, and C. Weber, High-pressure structural systematics in neodymium up to 302 GPa, Phys. Rev. B 103,134117 (2021)

[2] S. E. Finnegan, M. G. Stevenson, E. J. Pace, C. V. Storm, J. D. McHardy, M. I. McMahon, S. G. MacLeod, E. Plekhanov, N. Bonini, and C. Weber, High-pressure structure of praseodymium revisited: In search of a uniform structural phase sequence for the lanthanide elements, Phys. Rev. B **105**, 174104 (2022).

[3] S. Heathman, R. G. Haire, T. Le Bihan, A. Lindbaum, K. Litfin, Y. Méresse, and H. Libotte, Pressure Induces Major Changes in the Nature of Americium's 5*f* Electrons, Phys. Rev. Lett. **85**, 2961 (2000)

[4] S. Heathman, R. G. Haire, T. Le Bihan, A. Lindbaum, M. Idiri, P. Normile, S. Li, R. Ahuja, B. Johansson, and G. H. Lander, A High-Pressure Structure in Curium Linked to Magnetism, Science 309, 110 (2005).
[5] S. Heathman, T. Le Bihan, S. Yagoubi, B. Johansson, and R. Ahuja, Structural investigation of californium under pressure, Phys. Rev. B 87, 214111 (2013).

[6] D. T. Sneed, P. Söderlind, E. F. O'Bannon, H. Cynn, D. Smith, J. S. Smith, C. Park, and Z. Jenei, High-pressure structural systematics of dysprosium metal compressed in a neon pressure medium to 182 GPa, Phys. Rev. B **105**, 214110 (2022).

CuInP₂S₆ 全温区结构和铁电性能研究

<u>李一凡1</u>、罗永发1.2、姚晓东1、白印鑫1、朱金龙1.3.4*

物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心,南方科技大学,深圳 518055
 2)物理系,数理学院,上海师范大学,上海 200234

3) 粤港澳大湾区(广东)量子科学中心, 深圳 518045

4) 新材料重大科学设施研院所,南方科技大学,深圳 518055

Email: zhujl@sustech.edu.cn

摘要:

CuInP₂S₆(CIPS) 是范德华层状铁电体,由于具有可以在几纳米的厚度下保持的铁电性、压电性和热电效应、单轴 四势阱、负压电效应、自发极化与 Cu 基缺陷偶极子强耦合等独特的性质,在高集成度铁电器件中有着巨大的应用潜力, 在近年来受到了人们的广泛关注。CIPS 在实际应用中的阻力之一是极化强度较小。先前已经有文章报到了常温下高压导 致的极化增强。在这里,我们通过测量极化-电场回线得到了 CIPS 在铁电相(空间群 Cc)的极化随温度和压力的变化, 发现 CIPS 的两个极化最大值出现在高温高压和低温高压条件下,还在常温 2 GPa 附近发现了高温退火激活的极化增强, 并通过拉曼光谱揭示了极化变化背后的物理演变过程。我们通过对拉曼光谱的分析证明了高温高压条件下的极化增强和 常温 2 GPa 附近高温激活的极化增强是由于 Cu 离子在对应高极化态的 S 原子平面外位点的占据率增加;高压低温条件 下极化的增强则是由于铜离子的有序程度增加。我们还报道了 0-10 GPa, 0-600 K 区间内 CIPS 的温度驱动和压力驱动 的相变边界以及 Cc 相低温条件下的偶极子有序化和 Cu 离子的冻结。我们的工作为提高铁电材料的极化强度提供了新的 思路,这有不仅助于推动二维范德华铁电材料在电子器件中的应用,而且可以帮助我们理解铁电材料在温度和压力作用 下的行为,并为通过应力工程实现 CIPS 的高极化态及器件应用提供实验支撑。





关键词: CuInP₂S₆,范德华铁电体,高压

高压下硫族代磷酸盐的高压金属化相变

李玉强*,李宇鸿,刘洋,宁平凡,刘宏伟,牛萍娟,赵丽霞

天津工业大学电子与信息工程学院, 天津市光电检测技术与系统重点实验室,天津,300387 *Email: liyuqiang@tiangong.edu.cn

过渡金属硫族代磷酸盐TMPT3(TM = Fe, Mn 和Cd; T = S 和Se)作为具有优异性能的磁 性材料代表之一,在高压条件下其物理和化学性质变化将引起其电子结构及输运行为的重 要转变,产生优良的磁电、压电、光电及热电特性,从而广泛应用于电子、物理、材料和 能源领域。通过金刚石对顶砧表面集成的微电路进行了FePS3和MnPS3的原位高压电学实验。 电学参数的变化表明FePS3经历了压致相变,其中电阻率和霍尔系数的突然降低是由载流子 浓度和迁移率的突然增加共同引起的,FePS3在约13.3 GPa的压致金属化相变也引起了磁阻 从正到负的转变,光电导率特性表明,压力将价带中的电子激发跃迁到导带中产生电子-空 穴对。关于MnPS3,高压电学参数的突变揭示了约29.2 GPa的可逆结构相变,霍尔系数的正 负反转表明了p型半导体到n型的转变。电阻率的温度系数由负转变为正,表明MnPS3经历 了从半导体到金属的转变,金属化相变的压力点在约29.5 GPa。采用第一性原理计算方法, 我们发现了过渡金属硫族代磷酸盐的压致结构相变,基于能带闭合,确定了FePS3、FePSe3、 MnPS3、MnPSe3、CdPS3和CdPSe3的金属化相变压力。



图1 MnPS3 的高压结构和输运特性研究示意图

- [1] Appl. Mater. Today. 2024, 37: 102129.
- [2] Vacuum. 2024, 226: 113318.
- [3] Vacuum. 2024, 221: 112922.
- [4] J. Mater. Sci. 2023, 58: 16144-16159
- [6] J. Mater. Sci. 2023, 58: 3657-3669.
- [5] Mater. Today. Commun. 2023, 36: 106661.
- [7] J. Mater. Chem. C. 2021, 9: 17371-17381.
- [8] Appl. Phys. Lett. 2015, 107: 142103

原位 SAXS 研究高静水压力处理对牛奶微观结构的影响

刘广峰、张建桥、李怡雯、宋攀奇、李娜

中国科学院上海高等研究院国家蛋白质科学研究(上海)设施 Email: liuguangfeng@sari.ac.cn

摘要:

高压技术在牛奶灭菌和奶粉加工过程中起到了巨大的作用。在高压处理的过程中,牛奶成分中的酪蛋白胶束是被破坏,这被认为是影响牛奶质地和口感的重要因素。本研究通过小角X射线散射(SAXS)研究了不同加工工艺处理的牛奶样品的纳米结构,同时结合高压技术原位研究牛奶内的结构变化。鲜牛奶在23°C下被加压至250 MPa,并保持5或10 min。未经高压处理的鲜牛奶在q值为0.155Å⁻¹处有一个明显的峰,这来自于脂肪颗粒的周期结构,在中等q值处(约0.04~0.1Å⁻¹)的小酪蛋白簇贡献则明显高于高压处理的产品。在原位研究中,随着压力增加,0.155Å⁻¹处的脂肪峰得到了加强,最终在250 MPa压力后,峰消失。小团簇则逐渐消失。高压处理过程中的压力和温度不仅对酪蛋白胶束的大小有重大影响,还对其内部结构中的"蛋白质不均匀性"产生影响。



图 1 不同压力下,牛奶的 SAXS 曲线

关键词: SAXS, 高压处理, 纳米团簇, 酪蛋白 参考文献

- 1. Zhi Yang, Qinfen Gu, Weam Banjar, Na Li, Yacine Hemar, In situ study of skim milk structure changes under high hydrostatic pressure using synchrotron SAXS, *Food Hydrocolloids*, 77, 2018, 772-776,
- 2. Shuailing Yang, Arwen I.I. Tyler, Lilia Ahrné, Jacob J.K. Kirkensgaard, Skimmed milk structural dynamics during high hydrostatic pressure processing from in situ SAXS, *Food Research International*, 147, 2021, 110527,

单斜相 Cr5Te8 中反常霍尔效应的压力调控

刘净宜1,蒋绍龙2,朱金龙1,2,3*

 物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心, 南方科技大学,深圳 518055

2) 粤港澳大湾区(广东)量子科学中心, 深圳 518045

3) 新材料重大科学设施研院,南方科技大学,深圳 518055

Email: zhujl@sustech.edu.cn

摘要:

虽然对于反常霍尔效应(AHE)的研究历史悠久,但对于反常霍尔效应机制的分离仍然十分困难。 先前常用的方法是通过改变磁性材料的薄膜厚度来实现对 AHE 的内禀机制和外在机制的分离。然而之 后的研究表明贝利曲率有显著的厚度依赖性,从而对内禀机制造成很大的影响。相比之下,压力作为一 种干净且连续可调的调控参量,能够在单一样品中实现对 AHE 机制的有效分离。在本工作中,我们以 单斜相 Cr₅Te₈(*m*-Cr₅Te₈)铁磁体为研究对象,开展了系统的高压反常霍尔效应的调控和高压电输运的 测量。通过对不同压力下的霍尔数据进行拟合,实现了对内禀机制与外在机制对 AHE 贡献的半定量分 离。在调控过程中,我们还观测到一系列非常规现象:AHE 回线在压力作用下发生了罕见的"双重反 转"——由顺时针转为逆时针,再转回顺时针。这一现象可归因于载流子类型的反转及磁结构的压力诱 导转变。在磁结构变化附近,还观测到了非常明显的由复杂的非共面磁结构而产生的拓扑霍尔效应 (THE)信号,表明系统可能进入了量子涨落非常强的区域。以上结果不仅丰富了 *m*-Cr₅Te₈的输运相图, 还证明了压力作为一种干净的调节手段,为深入理解反常霍尔效应的内在机制贡献和外在机制贡献提供 了新的实验路径和分析方法。





关键词:二维铁磁体; m-Cr5Te8; 反常霍尔效应; 高压

二维 Janus 材料 RhSeCl 在高压下的结构和非线性光学性能

刘克凤、王歆宇、缑慧阳

北京高压科学研究中心 Email: kefeng.liu@hpstar.ac.cn

摘要:

近年来, Janus 结构材料因其结构不对称性在电子与光学领域展现出独特潜力。本研究聚焦于二维 Janus RhSeCl 在高压极端条件下的结构演化、相变行为及其非线性光学响应的调控机制。通过金刚石对顶砧 技术结合原位高压拉曼光谱、同步辐射、X 射线衍射以及二次谐波、光电流测试手段,系统揭示了该材 料在 0-80GPa 压力范围内的结构稳定性与相变路径。实验表明,RhSeCl 在高压诱导下发生从非中心对称结构(Space group: *P6₃mc*)向中心对称结构的转变,伴随其二次谐波响应在 50GPa 附近消失。同时,实 验观测到电子主导的光电流迁移率在 50GPa 提升 10³ 量级。本研究阐明高压对 Janus 材料"结构-性能"关系的调控规律,为开发压力自适应光电探测器与非线性光学调制器件提供新思路。



图 1 (a)常压下 RhSeCl 晶体结构; (b)高压驱动 RhSeCl 二次谐波强度变化; (c)40~65GPa RhSeCl 拉曼光 谱; (d)0~65GPa 拉曼振动模峰位随压力变化

关键词: Janus 结构、不对称性、高压结构演变、非线性光学响应

Pressure-induced phase transitions and decompositions of Sr-S compounds

Yong Liu, Jianfu Li, Yanlei Geng, Zhenzhen Xu, Yang Lv, Zhaobin Zhang,

Jianan Yuan, and Xiaoli Wang

School of Physics and Electronic Information, Yantai University Email: Yongliu@ytu.edu.cn

Abstract:

The processes involved in the high-pressure phases of Sr-S compounds and the pressure-induced decomposition into strontium and sulfur are investigated using a structure prediction approach combined with first-principles calculations. The compression of Sr-S compound leads to its decomposition into strontium and sulfur at 794 GPa, which contradicts the general intuition that pressure stabilizes and densifies materials. With increasing pressure, the combined effect of the Δ PV and Δ U term increases the enthalpy difference, ultimately leading to the decomposition of the Sr-S compound. Moreover, the analysis based on molecular orbital theory reveals that pressure induces an increased population of antibonding states, consequently reducing the stability of the compound and promoting its decomposition. Furthermore, the analysis of atomic interactions reveals that under pressure, the reduction of charge transfer between atoms causes a decrease in electrostatic interactions, thereby weakening the stability of the compound and resulting in its decomposition into strontium and sulfur atoms. This work not only demonstrates the high-pressure properties of Sr-S compounds but also provides insight into understanding other high-pressure alkaline-earth sulfides.

Keywords: High-pressure decomposition; First-principles calculations; Alkaline-earth metal sulfides References:

- G. Sharma, N. Munjal, V. Vyas, R. Kumar, B.K. Sharma, K.B. Joshi, Electron momentum density, band structure, and structural properties of SrS, J. Exp. Theor. Phys. 117 (2013) 747–753.
- S. Sharma, J. Sharma, Y. Sharma, DFT calculations of electronic and optical properties of SrS with LDA, GGA and mGGA functionals, 1728 (2016) 020095.
- 3. Y. Wang, A. Bergara, C. Shao, L. Wang, X. Liang, L. Wang, R. Sun, X. Wei, T. Wang, G. Gao, Y. Tian, Phase transitions of alkaline-earth metal sulfides under pressure, Mater. Res. Express. 8 (2021) 065902.

范德华反铁磁材料(Fe1-xCox)5CoTe2中压力诱导连续自旋转向

黄祥^{1,2}、陆龙玉^{1,2}、王国鹏³、牛群^{1,*}、田明亮^{1,3}

¹中国科学院合肥物质科学研究院强磁场科学中心 ²中国科学技术大学研究生院科学岛分院 ³安徽大学物理与光电工程学院 Email: gniu@hmfl.ac.cn

摘要:

在单层极限下,二维磁性材料仍能在有限温度保持本征磁有序,展现出层数与堆叠方式依赖的宏观 磁性等新颖量子特性[1]。相较于三维体系因层间自旋相互作用不足导致二维极限下长程磁有序失稳, 二维系统通过强磁晶各向异性实现稳定的自旋构型[2]。这种稳定性在范德瓦尔斯磁体中尤为显著,其 层间间接交换耦合作用放大了磁各向异性,为理解基础机理和推进自旋电子学应用提供了新视角。

近年来,范德瓦尔斯铁磁体 FesGeTe2因其高达 310 K 的磁转变温度备受关注。然而其单层体系硬磁转变温度显著抑制至约 100 K[3]。近期研究表明,通过构建反铁磁/铁磁异质结构可将该温度大幅提升。 基于此策略,研究者成功合成新型化合物(Feo.seCoo.44)sGeTe2,该材料在保持面内铁磁性的同时发展出垂 直面外反铁磁有序。尤为突出的是,其块体材料磁转变温度达~340 K,单层样品在室温下仍保持铁磁性。

我们通过金刚石对顶砧对(Feo.soCoo.44)sGeTe2纳米片进行压力调控,并开展压力依赖输运测量。在压力下,当磁场沿易磁化 c 轴取向时,该材料呈现出连续自旋翻转相变,该现象可能源于压力诱导的层间 滑移重构。对过掺杂样品的扫描透射电子显微镜 (STEM)表征证实了 AABB 型层间堆叠有序,为上述 观测提供了结构佐证。在更高压力下,连续相变演化为类常压的单相变行为并迅速被抑制。这些发现不 仅揭示了层间堆叠序在稳定(Feo.soCoo.44)sGeTe2反铁磁态中的关键作用,同时确立了静水压作为调控范德 瓦尔斯层间构型的重要手段。

关键词: 范德华磁性材料、金刚石对顶砧、层间滑移

参考文献

[1] Seo, J., An, E.S., Park, T. et al. Nat Commun 12, 2844 (2021).

[2] Mermin, N. D. & Wagner, H. et al. Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966).

[3] Longyu Lu, Qing Wang et al.Nano Lett. 2024, 24, 20, 5984 (2024)

48

高压下半结晶聚合物 PEEK 光学带隙演化及结构调控机制

史冰倩1、柳雷1*

¹中国工程物理研究院流体物理研究所,冲击波物理与爆轰物理国家重点实验室,四川 绵 阳 621999

Email: shibingqian24@gscaep.ac.cn

摘要:

高性能聚合物在极端高压环境下的结构-性能关联,是实现柔性电子器件与聚合物太阳能电池性能 调控的关键问题。本文以典型半结晶芳香族聚合物聚醚醚酮(PEEK)为研究对象,通过金刚石对顶砧 (DAC),结合原位紫外-可见光吸收谱、同步辐射X射线衍射(XRD)及显微成像技术,系统研究了 PEEK 在 0-35 GPa 压力范围内的晶体结构变化及带隙演化机制^[1]。XRD 实验结果如图 1(a)所示,PEEK 在压力升高过程中晶体相的衍射峰逐渐降低并展宽,在约 15 GPa 以上可能实现了非晶化。原位紫外-可见光吸收谱揭示,在加压过程中,PEEK 的带隙随压力增加而减小(如图 1(b)所示),这一趋势可能 源于压力诱导分子链压缩与π-π堆积增强,从而加剧轨道重叠^[2]。显微图像直观呈现了材料在加压过程 中显著的颜色变化,且在卸压回到环境压力时颜色未能恢复至初始状态,这表明 PEEK 在高压条件下经 历了不可逆的结构演变与重排,导致其光学性质发生永久性变化。本项研究结果证实,无需化学修饰, 仅通过高压这一物理手段即可有效调控宽带隙聚合物的电子结构与光学性能,拓展了极端条件下聚合物 研究视野。





- Chen, Y.; Yang, N.; Zhang, Y.; Liu, L. Isothermal Equation of State of Polyether Ether Ketone (PEEK) by Optical Imaging Method in Diamond Anvil Cell. Polymers 2025, 17, 655.
- Sun, Y.; Cao, B.; Chen, S.; Wang, X.; Duan, D.; Tian, F.; Cui, T. A Discovery of Pressure-Induced New Semiconductor Electronic Phase Transitions by DFT Calculations: Introducing a Glimpse of a Novel Semiconductor Family. ACS Appl. Mater. Interfaces 2024, 16, 60482–60490.

压力对多铁性氧化物 Ni₃TeO₆结构和带隙的调控研究

苏琪琦1、耿华运1*、柳雷1*

1 中国工程物理研究院流体物理研究所,冲击波物理和爆轰物理重点实验室,四川 绵阳 621999

Email: suqiqi22@gscaep.ac.cn

摘要:

多铁性材料是一类铁电序与磁序共存、同时打破空间反演对称性和时间反演对称性的新型功能材料。然而,高压对多铁性材料性能的调控机制仍缺乏系统研究。本文以极性 R3 结构的典型多磁矩协同多铁性材料 Ni₃TeO₆为研究对象,采用金刚石对顶砧技术,结合原位同步辐射 X 射线衍射、高压拉曼光 谱和紫外-可见吸收光谱等表征手段,系统研究了室温高压下其晶体结构演变与带隙调控规律。X 射线 衍射结果表明,在 60 GPa 压力范围内 Ni₃TeO₆未发生空间群转变,但不同 O-Ni-O 键长呈现非均匀变化。 拉曼光谱如图 1(a)所示,在 5、11、21 和 44 GPa 压力点出现拉曼模式压力系数(dω/dP)的突变,逐渐变 小,其中高频拉曼峰的位移速率显著大于低频峰,表明其振动模式主要源于氧原子位移^[1]。紫外-可见 吸收光谱分析如图 1(b)所示,材料带隙随压力呈现非线性演化:0 - 10.13 GPa 区间带隙减小,10.13 - 20.78 GPa 区间带隙增大,20.78 - 40.41 GPa 区间再次减小,40.41 - 56.75 GPa 区间重新增大,该演化规律与 拉曼光谱特征具有一致性。综合结构表征证实,上述压力诱导转变过程具有可逆性。本研究为理解多铁 性材料的高压行为提供了新见解,对其局部结构调控和带隙工程具有重要理论指导意义。



图 1 (a) Ni₃TeO₆高压拉曼频率-压力曲线 (b) Ni₃TeO₆带隙随压力变化图 关键词:多铁性;高压;X射线衍射;拉曼光谱;紫外-可见吸收光谱 参考文献

 O' NEAL K R, CLUNE A J, HARMS N C, et al. High-pressure spectroscopic investigation of multiferroic Ni₃TeO₆[J/OL]. Physical Review B, 2018, 98(18): 184101. DOI:10.1103/PhysRevB.98.184101.

CL-20 基主客体炸药的高压制备和结构稳定性研究

孙晓宇、叶春晖、王昊、麦棣、代如成、王中平、张增明

中国科学技术大学物理学院 Email: xysun2015@ustc.edu.cn

摘要:

能量和安全性是衡量含能材料性能的两大重要指标。CL-20(又称 HNIW),全称六硝基六氮杂异 伍兹烷,分子式为 C₆H₆N₁₂O₁₂,是一种典型的三维笼型硝铵炸药,其具有高能量密度和优良的爆轰性能, 但感度也明显高于一般炸药,极大程度上限制了其实际应用。为了降低 CL-20 感度,本文采用主客体 化学的思想,通过高压技术与气体填充装置相结合,将特定的一些小分子活性物质嵌入 CL-20 晶胞空 腔中,构建了多种以 CL-20 笼型晶格为主体的新型主客体复合结构,如 CL-20/N₂O、CL-20/CO₂、CL-20/O₂ 等。小活性分子与炸药分子之间形成新的氢键等相互作用,经过特定时间的化学反应最终形成主客体结 构。研究结果表明,主客体结构维持α-CL-20 的 Pbca 空间群,属于正交晶系。同时对新型主客体炸药 的高温稳定性和高压结构演化进行了系统研究,发现此类复合材料在高温、高压及激光辐照等极端条件 下表现出优于纯 CL-20 晶体的结构稳定性。研究揭示了高压条件下合成的 CL-20 基主客体复合结构, 对提升 CL-20 的综合性能具有深远意义。



图 1 CL-20/N₂O 主客体炸药单晶高压合成与形貌结构表征

关键词: 主客体炸药; 拉曼光谱; 结构解析; 高压合成 参考文献

- 1. 张增明; 孙晓宇; 代如成; 等. 一种气体分子嵌入 CL-20 的主客体炸药及其制备方法, 中国发明专利. 2021.
- 2. Martin, S. S.; Marre, S.; Guionneau, P.; et al. Chem. Eur. J. 2010, 16: 13473-13478.
- 3. Xu, J.; Zheng, S.; Huang, S.; et. al. J. Chem. Commun. 2019, 55: 909-912.

高压下电子结构诱导锂液−液相变研究

童群超1、曾启呈1、刘鹏2、张珅1、张云蔚3、吕健4、戴佳钰1

1国防科技大学理学院
 2江西师范大学物理与通信电子学院
 3中山大学物理学院
 4吉林大学物理学院
 Email: jydai@nudt.edu.cn

由于液体缺少晶格周期性及长程序,与固-固或固-液相变相比,液-液相变诊断更加困难,因此,液-液相变的确定须要综合原子结构,电子结构及物性。本工作结合密度泛函理论与机器学习势,以 600 K、常压到 80 GPa 的液相锂为模拟对象。研究结果表明约 30 GPa 时,液相锂从由 *s* 电子主导的近自由电子液体转变为由 *p* 电子主导的类共价液体,该转变伴随价带宽度的极值和热力学性质的奇异性。此外,随 压强增加,电子局域化程度逐渐增加并趋于饱和,导致液相锂的反常扩散行为和锂的反常熔化线。该发现不仅阐明锂在高压下的复杂电子行为,还为理解其他单质金属在高压下的液-液相变提供见解。



图 1 (a)600 K、不同压强下液态锂的径向分布函数 g(r),(b)配位数 CN 随压强变化,(c) r_{max2}/r_{max}比值 随压强变化,绿色线为线性拟合结果



图 2 (a)结构表征及降维示意图, (b)固相 BCC, FCC, cl16, oC40 及不同压强下液体结构在 PC-1 及 PC-2



所张空间的分布

图 3 (a)总 DOS 及 p 和 s 轨道投影 DOS、(b)价带宽度、(c)价带 p 轨道与 s 轨道电子占据数比值、(d)电 子局域度ω随压强变化



图 4 (a)密度、(b)扩散系数、(c)热膨胀系数、(d)等压热容随压强变化,实线为多项式拟合结果

参考文献

1. Ma, Y. et al. Transparent dense sodium. Nature 458, 182 (2009).

关键词: 高压、碱金属锂、液-液相变、机器学习势

- 2. Lv, J., Wang, Y., Zhu, L. & Ma, Y. Predicted Novel High-Pressure Phases of Lithium. Phys. Rev. Lett. 106, 15503 (2011).
- 3. Yang, J., Tse, J. S. & Iitaka, T. First-principles studies of liquid lithium under pressure. J. Phys. Condens. Matter 22, 095503 (2010).
- 4. Tamblyn, I., Raty, J.-Y. & Bonev, S. A. Tetrahedral clustering in molten lithium under pressure. Phys. Rev. Lett. 101, 075703 (2008).
- 5. Shu, Y. et al. Structural Changes in Liquid Lithium under High Pressure. J. Phys. Chem. B 124, 7258 (2020).
- 6. Zong, H. et al. Free electron to electride transition in dense liquid potassium. Nat. Phys. 17, 955 (2021).

高温高压处理实现高熵合金强塑性协同提高

王超、王海阔

浙江大学能源学院 Email: wangchoa1997@zju.edu.cn

摘要:

传统金属材料加工策略通常以牺牲延展性为代价来获得更高的强度,突破强度-延展性倒置关 系仍面临重大科学挑战。压力与温度的完美结合为调控金属材料的微观结构,提高其力学性能提供 了巨大的前景。

我们采用自行设计的大腔体六面顶压机技术,对高熵合金进行压力热处理,成功构筑了具有低 能界面的异质结构。结果显示:异质微观结构使高熵合金材料在不同尺度下具有多种变形机制,包 括位错、层错、变形条带和孪晶,此外,多种变形机制之间也能发生相互作用;低能界面的引入, 能够有效促进位错、层错的跨晶界/相界协调传递,缓解应力集中,从而阻止传统共晶高熵合金中 常见的界面开裂。实验证实,经过高温高压处理处理的高熵合金能够实现强塑性协同提高,其强度 增加了一倍,达到1150 MPa,拉伸塑性提高到36%。这种独特的高温高压处理策略为调控金属材 料的微观结构提供了一种新方法,同时为高强度高延展性材料的发展提供了一条新途径。

关键词: 高温高压、强塑协同、低能界面、组织调控

参考文献:

[1] Tang Yao, Chao Wang, Haikuo Wang* et al. Nature Communications 15, 3932 (2024).

动态压缩下多场耦合力致发光响应

<u>王毫1</u>,赵婷婷1,陈小辉2,李俊龙2,李梅1,彭赏1,刘旭强 1,林传龙1*,杨文革1

*Email: chuanlong.lin@hpstar.ac.cn

Email: hao.wang@hpstar.ac.cn

1北京高压科学研究中心,北京海淀, 100094

2中国工程物理研究院, 流体物理研究所, 四川绵阳, 621000

力致发光(Mechanoluminescence, ML)作为一种将机械能直接转化为光能的独特现象, 其复杂的物理机制源于力致形变-压电效应-发光行为的级联耦合过程,这种力-电-光多场协 同作用使其在智能传感、人机交互及极端环境监测等领域展现出重要应用价值。值得注意的 是, 作为调控物质光-力耦合特性的核心参数, 温度与压力通过改变原子间势垒和电子态密 度分布深刻影响着 ML 材料的本征性能。然而当前 ML 研究多受限于传统复合材料体系的结 构缺陷:弹性光学树脂基体在高温(>400 K)下因玻璃化转变引发结构失稳,在低温(<200 K)时则因分子链冻结导致自修复功能失效,这种固有的温压敏感性将 ML 材料局限在 T≈300 K、P<1 MPa 的温和环境,难以满足深空极端低温(4-100 K)或核反应堆高压(0.1-1 GPa) 等场景需求。更关键的是,现有 ML 调控策略过度依赖化学压力手段(如离子掺杂、晶格取 代等),而基于物理外场(特别是 GPa 级高压)的调控研究严重滞后,导致对 ML 过程中 电子跃迁与压电极化的内在关联缺乏本质认知。金刚石对顶砧技术可通过诱导键长压缩 (>10%)、电子轨道杂化及界面极化等效应,突破传统化学固溶极限,实现发光性能的连 续精准调控。对于过渡金属和镧系金属离子掺杂的功能型 ML 材料,极端温压耦合场(尤其 伴随快速加载时)中的动态响应规律、结构演化路径及其与光电性能的构效关系仍属未知, 系统揭示温度-压力-速率三要素协同作用下的 ML 动力学机制已成为该领域亟待解决的关键 科学问题。

关键词: 高压, 动态压缩, 力致发光, 多场耦合, 结构性能 参考文献

1 **Hao Wang**, Tingting Zhao, Mei Li, Junlong Li, Ke Liu, Shang Peng, Xuqiang Liu, Bohao Zhao, Yanlong Chen, Jiao An, Xiaohui Chen, Sheng Jiang, Chuanlong Lin and Wenge Yang. Oscillatory mechanoluminescence of Mn²⁺-doped SrZnOS in dynamic response to rapid compression. **Nature Communications**, 2025, *16*: 548.

2 Hao Wang, Xiaohui Chen, Junlong Li, Mei Li, Ke Liu, Dongliang Yang, Shang Peng, Tingting Zhao, Bohao Zhao, Yanchun Li, Yonggang Wang, Chuanlong Lin and Wenge Yang. Pressure- and Rate-Dependent Mechanoluminescence with Maximized Efficiency and Tunable Wavelength in ZnS: Mn²⁺, Eu³⁺. ACS Applied Materials & Interfaces, 2023, *15*(23): 28204–28214.

Tuning Bandgaps and Correlations in Graphene Moiré Superlattices

with High Pressure

<u>王宇鹏¹</u>、叶春晖¹、张增明^{1,2} 1. 中国科学技术大学 物理系 2. 中国科学技术大学 物理实验教学中心 Email: zzm@ustc.edu.cn

摘要:

We utilize advanced high-pressure quantum transport techniques to dynamically tune and explore the electronic properties of graphene-based moiré superlattices, reaching pressures near the encapsulation limits of van der Waals devices. In aligned graphene/h-BN systems, applied pressure significantly enhances the moiré potential strength, evidenced by a near-doubling of the primary bandgap and the first experimental observation of an emergent tertiary bandgap above 6.4 GPa. For large-angle twisted bilayer graphene, pressure-induced moiré band compression facilitates the systematic study of the emergence, evolution, and suppression of correlated insulating states at various fractional fillings, alongside a notable enhancement of the correlated gap at charge neutrality point. Furthermore, we found that the band topology at filling factors 1/4, 1/2, and 3/4 in this system can be tuned by high pressure. Our work establishes hydrostatic pressure as a critical tuning parameter for reshaping moiré band structures and investigating correlated and topological phenomena in moiré superlattice.

关键词: High Pressure, Moiré Superlattices, Twisted Bilayer Graphene, Quantum Transport, Correlated Insulating States.
高压下零维锑基金属卤化物的压力诱导发光增强研究

吴金斐、罗庆义、陈彦同、房媛媛

聊城大学物理科学与信息工程学院 Email: wujinfei2023@163.com

摘要:

参考文献

近年来,低维有机-无机杂化金属卤化物(OIMHs)由于其独特的量子约束效应和较大的激子结合能, 表现出与 3D 金属卤化物钙钛矿显著不同的光电性能。有机组分和无机组分之间的电子耦合程度也成为 主要的研究方向。尽管如此,有机配体和金属卤化物之间微弱的电荷转移效应限制了光电性能的进一步 调节。在这里,我们实现了 0D TPP₂SbBr₅的压力诱导荧光发射,并利用原位实验表征研究其潜在机制。 因含锑 OIMHPs 具有独特的立体活性与 5S² 孤对电子, 能够在光激发下引发显著的结构畸变。导致在较 低压力下,TPP₂SbBr₅的荧光出现微弱的蓝移减弱,并伴随着吸收边的蓝移。随后,压力调节有机配体 和金属卤化物的界面相互作用,获得了更高的荧光寿命增强以及多达40倍的荧光发射增强。原位实验 表征和理论计算表明,压力促使 Sb³⁺的孤对电子与苯环的π电子产生孤对电子-π相互作用(LP-π相互作 用),为有机和无机界面电荷转移提供了"载体"。值得注意的是,在压力释放后,荧光发射明显增强。 这归因于不可逆的结构扭曲与破坏。我们的工作为实现有机配体和无机金字塔之间的电荷转移提供一种 新的策略,并为 0D 杂化金属卤化物的压力诱导发射提供了新的见解。



1. Origin of singlet self-trapped exciton and enhancement of photoluminescence quantum yield of organic-inorganic hybrid antimony(III) chlorides with the [SbCl₅]²⁻ units.

一维之字形共边钙钛矿($C_6H_{10}N_2$)PbX₄ (X = Br, Cl)的压力诱导激发

相关发射颜色调谐与增强

吴学仟,ª 王玲瑞,ª* 郭海中 a,b*

a 郑州大学物理学院,郑州 450001
b 河南省科学院量子材料与物理研究所,郑州 450046
Email: wanglr@zzu.edu.cn; hguo@zzu.edu.cn.

摘要:

一维之字形共边钙钛矿以其独特的结构和光电性能引起了人们的广泛关注。最近的工作集中在改进这些结构,以提高它们在各种应用中的效率。本文利用高压来调节两种 Pb 基钙钛矿 (AMP) PbCl₄和 (AMP) PbBr₄ (其中 AMP²⁺ = C₆H₁₀N₂²⁺) 的性质,这两种钙钛矿的特征是由 AMP 通过氢键连接的一维之形边 共享[PbX₄]²⁻。链。在这两种钙钛矿中观察到一种逆激发依赖的发射现象和发射增强,这归因于非均匀配 位[PbX₆]⁴⁻八面体的收缩。压力诱导的晶格收缩促进了 Pb 和 X 轨道的重叠,导致带隙减小。同时,由 于[PbX₆]⁴⁻八面体的畸变,压力诱导的相变导致带隙的不连续减小。这些高压光学和结构探索有助于系 统地设计具有所需特性的卤化物钙钛矿。



关键词: 1D 卤化物钙钛矿,激发相关发射,高压,压力诱导发射增强,相变参考文献

- [1] Y. Fang, T. Shao, L. Zhang, et al., "Harvesting high-quality white-light emitting and remarkable emission enhancement in one-dimensional halide perovskites upon compression," JACS Au. 1, 459 (2021).
- Y. Shi, Z. Ma, D. Zhao, et al., "Pressure-Induced Emission (PIE) of One-Dimensional Organic Tin Bromide Perovskites," J. Am. Chem. Soc. 141, 6504 (2019).
- [3] Y. Wang, S. Guo, H. Luo, et al., "Reaching 90% photoluminescence quantum yield in one-dimensional metal halide C₄N₂H₁₄PbBr₄ by pressure-suppressed nonradiative loss," J. Am. Chem. Soc. **142**, 16001 (2020).

高温高压下过渡金属硅化物和氮化物陶瓷的制备、性能与应用研究

肖成香、于亚杰、陈海花

青海大学机械工程学院

Email: xcx101112@126.com

氮化物陶瓷(如 Si₃N₄、TiN)和硅化物陶瓷(如 TaSi₂)作为两类重要的先进结构-功能一体化陶瓷 材料,在航空航天、能源电力、电子信息等国家战略领域具有不可替代的作用。氮化物陶瓷因其优异的 力学性能、高热导率和化学稳定性,已成为高温结构件和电子封装的首选材料;而硅化物陶瓷凭借独特 的金属-共价键混合特性,兼具良好的导电性和高温抗氧化性,在高温电热元件和集成电路领域展现出 独特优势。本研究采用高温高压(HPHT)技术制备了致密的 TaSi₂、Si₃N₄和 TiN 陶瓷,系统研究了烧 结参数对微观结构和性能的影响。结果表明,在 5.5 GPa/1000 ℃烧结条件下制备的 TaSi₂具有最佳力学 性能;并且随烧结温度升高,Si₃N₄陶瓷断裂韧性和热导率得到显著提升。理论计算与实验结果吻合, 证实了 HPHT 在细化晶粒、提高致密度和性能方面的优势,为高性能陶瓷设计提供了新思路。

关键词:二硅化钽;氮化硅;氮化钛;微观结构;物理性能



图1 实验流程图

参考文献

- Yajie Yu, Shi He, Zhenggang Zhang, Haihua Chen, Peipeng Jin, Binnian Zhong, Linhui Zhang, Liping Wang, Cheng Lu, Multifunctional tantalum disilicide ceramics sintered at high temperature and high pressure, J. Am. Ceram. Soc. 107 (2024) 606-614.
- 2. Yajie Yu, Zhenggang Zhang, Chengxiang Xiao, Haihua Chen, Cheng Lu, Jianyi Ma, Investigation of the microstructure and physical properties of TaSi₂ sintered at high temperature and high pressure, J. Mater. Res. Technol. 29 (2024) 3108-3116.

Thickness Dependence of Optical and Electronic Properties of FeCl₂

Films under High Pressure

<u>闫志鹏^{1,2}</u>、杨其朔¹、蒋绍龙¹、代光阳¹、余熙熙¹、郑群飞¹、韩军¹、姚晓

东1、刘影1、林俊浩1、朱金龙1

¹南方科技大学理学院 ²兰州交通大学数理学院 Email: *zhujl@sustech.edu.cn*

摘要:

在本研究中,我们采用创新方法系统研究了压力对块体 FeCl₂和 600 nm 厚度 FeCl₂薄膜的晶体结构、 电输运特性及光学带隙的调控作用。通过综合运用拉曼光谱、电输运测量和紫外-可见吸收光谱技术, 我们获得了以下重要发现:拉曼光谱数据分析表明,在加压过程中块体 FeCl₂与 FeCl₂薄膜的结构相变 序列存在显著差异。具体而言,块体 FeCl₂在 52 GPa 压力下发生绝缘体-金属相变,而 FeCl₂薄膜即使 在 60 GPa 高压下仍保持半导体特性。紫外-可见吸收光谱研究进一步揭示,块体 FeCl₂的直接带隙随压 力升高呈现单调递减趋势(从常压下的 1.8 eV 降至 52 GPa 时的 0.3 eV),而薄膜样品在压力超过 34.1 GPa 后其光学带隙反常增大(由 34.1 GPa 时的 0.7 eV 增至 60 GPa 时的 1.2 eV)。这些突破性发现为层状纳 米材料力学、电学和光学特性的精准调控提供了新的理论依据和实验基础。



图 1 压力诱导不同 600nm 和体相的 FeCl₂的带隙变化 关键词:二维过渡金属卤化物、高压、结构相变、光学带隙

压力诱导液态氢化锂的结构转变及热力性质的异常

颜小珍、陈杨梅、耿华运

江西理工大学理学院 中国工程物理研究院流体物理研究所 Email: s102genghy@caep.cn, yanxiaozhen@jxust.edu.cn

摘要:

理解液体结构及其在不同压力下的演化机制是凝聚物理与材料科学领域的重要挑战。本研究通过第一性原理分子动力学模拟,揭示了液态氢化锂(LiH)在宽压强(0-500GPa)范围内发生的压力诱导结构转变现象。该行为可描述为从低压下具有Li*-H-对偶对称性的液态,连续过渡到高压下对称性破缺的液态。同时,体系的热力学量(如摩尔热容)和离子输运性质(如扩散系数)均呈现显著响应。值得注意的是,这种现象属首次在离子液体中发现,而此类材料广泛存在于宇宙天体及工业应用中。通过构建LiH的高压-高温相图,揭示了这一曾被视作简单离子化合物的体系中所蕴含的丰富物理机制。



关键词:氢化锂,第一性原理分子动力学,相图,高压。 参考文献:

 Xiao Z. Yan, Yang M. Chen, Hua Y. Geng*, Yi F. Wang, Yi Sun, Lei L. Zhang, Hao Wang, and Yin L. Xu. Pressure-induced structure change and anomalies in thermodynamic quantities and transport properties in liquid lithium hydride. *Phys. Rev. B* 2025, 111(2): 024102.

压力诱导下 Cr0₂的结构转变和磁性变化 专题代号: A

姚安东、朱金铭、刘杰、王寒、王鑫、包括、崔田

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: yaoad22@mails.jlu.edu.cn

摘要:

CrO₂ 是研究磁性材料中原子间距与磁有序关系的理想材料之一,且理论预测其高压下结构相图和 磁性变化存在着差异^[1,2]。我们通过高压手段发现其在高达 113 GPa 的压力范围内经历由铁磁性金红石 相 (*P*4₂/*mnm*)向 CaCl₂型 (*Pnnm*)、*Pbca*和*Pnma*结构的演化。交流磁化率测试表明 CrO₂在 30.3 GPa 与 48.7 GPa 发生两次磁转变,前者为 CaCl₂相内的二阶磁相变,后者伴随 CrO₆ 八面体的破坏导致铁磁 性与半金属性的消失。第一性原理计算表明,30.3 GPa 时 Cr 3d 轨道在费米面处的态密度显著降低,是 磁性削弱的电子本质原因。本研究揭示了 Cr--Cr 距离对磁性的主导作用,并为高压下磁性材料中交换相 互作用的演化提供了重要参考。



图 1 (a) CrO₂交流磁化率的变化。(b) CrO 在 19.2、35.6 和 49.2GPa 下的磁化曲线。插图显示了 49.2 GPa 下磁化曲线的放大图。(c) 最近邻和次最近邻 Cr-Cr 距离的压力依赖性。(d) 通过 XRD 获得的 CrO2

各相的结构示意图。点划线表示交流敏感性发生变化的压力点。

关键词: 高压物理、磁性测量、原位 XRD、第一性原理计算 参考文献

1. H. Wu, Y. Chen, C. Deng, and X. Su, Phase Transitions 85, 708 (2012).

2. S. X. Huang, X. Wu, J. J. Niu, and S. Qin, Rsc Advances 8, 24561 (2018).

成分对压力诱导高熵合金多形性转变的影响

张飞1、楼鸿波2、刘雨鑫2、曾桥石2

 中国科学院高能物理研究所
北京高压科学研究中心 Email: fzhang@ihep.ac.cn

Recently, pressure-induced polymorphic phase transitions were recently discovered in several fragmented high-entropy alloys (HEAs), offering a valuable opportunity to deepen our understanding of these materials. However, the chemical and physical factors that govern these transitions are still unclear. Here, we combined *in situ* highpressure and high-temperature synchrotron X-ray diffraction, X-ray emission spectroscopy (XES), and high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM) to systematically study the evolution of the atomic and electronic structures in the Cantor alloy and its face-centered-cubic (*fcc*) subset alloys. Surprisingly, diverse behavior was observed among these closely related alloys during compression and decompression, which includes irreversible, reversible *fcc* to hexagonal close-packed (*hcp*) phase transitions, or even no detectable phase transitions up to ~40 GPa. HRTEM measurements confirmed that the *fcc and hcp* phases abided by the classic Shoji-Nishiyama orientation relationship during the transitions. XES data indicated that high-pressure suppresses the local magnetic moments in all the studied alloys, suggesting that magnetic states do not significantly influence the polymorphic transitions. By comparing the effects of the atomic size difference, entropy, valence electron concentration, and stacking fault energy across all the compositions studied, only the stacking fault energy shows a strong correlation with the phase transitions, indicating it plays a key role in inducing polymorphism in HEAs.

关键词: high-entropy alloys, high pressure, polymorphic transition, synchrotron x-ray techniques 参考文献

- 1. Fei Zhang, et al, Nat. Commun., 2017, 8, 15687.
- 2. Fei Zhang et al., Entropy, 2019, 21(3), 239.
- 3. Fei Zhang, et al, Mater. Today Chem., 2024, 42, 102435.

高压下手性 HgS 的螺旋结构转变与伴生的超导转变

张赫、钟韦、孟养浩、汤博文、岳彬彬、于晓辉、洪芳

中国科学院物理研究所 Email: zhanghe@iphy.ac.cn

摘要:

螺旋性的结构表现了一种自然状态下电荷分布的涨落行为,从某种程度上类似于电荷密度波。那么 能否在一个巨大带隙的系统中,通过调控抑制螺旋结构从而引发超导则成为一个有趣的问题。再次我们 报告了在具有 1.9 eV 能隙的手性α-HgS 中,由压力驱动的螺旋-非螺旋转变以及超导电性。最大的超导 临界温度在 25.4 GPa 达到了 11 K,并且转变温度-上临界磁场关系显示出多带特征。此外,在 8 GPa, 由于螺旋链间距的减小,发现一个类似等结构相变伴随着直接-简介带隙转变,同时二次谐波显示一个 很强的响应。声子软化在螺旋结构的稳定性和超导体的起到重要的作用。本文可启发对超导以及在其他 螺旋、手性体系中新物理的探索,并且可以拓展我们对此类材料丰富的物性的认识。



图 1. HgS 的相图显示了其带隙和转变温度在高压下的变化。超导转变 关键词: 超导,结构相变,金刚石对顶砧,手性

高熵硼化物高压下熔点的计算预测

张衡中

北京高压科学研究中心,上海 201203 Email: hengzhong.zhang@hpstar.ac.cn

摘要:

高熵硼化物具有好的导电性,高的硬度,以及耐高温、耐腐蚀和抗氧化等出众的材料性能。因此,它们在高速器件如火车轮轨和航空航天器等领域有着广泛的应用前景。其不同压力下的熔点对其结构稳定性和功能发挥至关重要。在以往的工作中,我们合成和测定了室温附近高熵硼化物(TaNbZrCrTiHf)B2在高压下的导电性和抗压性能[1,2]。在本工作中,我们用密度泛函理论(DFT)的计算方法对该化合物在温度为2000-4000 K和压力为0-20 GPa条件下的结构和原子运动进行了分子动力学(MD)模拟。基于从 MD 轨迹数据中提取的声子态密度,我们导出了该化合物的振动热力学函数,如内能,熵和热容等。我们发现,尽管 DFT-MD 的模拟时间有限,高温下的热力学函数已经包含熔体状态下原子快速运动的信息。利用热容对温度的变化,预测0压下的熔点约为2780 K,而20 GPa下的熔点则上升到约3360 K。进一步的工作将延长 MD 到更长的时间,以提高熔点预测的准确性。同时,将用激光加热 - 冷却曲线法或电阻测定的方法,从实验上测定其熔点,以对理论预测进行验证。

关键词: 高熵硼化物, 高压, 熔点, 分子动力学, 密度泛函理论

参考文献

1. Zhang et al., J. Phys. Chem. Lett., 2021, 12, 3106.

2. Zhang et al., J. Euro. Ceram. Soc., 2022, 4, 6951.

高压下金属卤素钙钛矿的光电性质调控

张龙^{1,*}、王永刚¹、邹勃²

¹北京大学,材料科学与工程学院,北京,100871 ²吉林大学,超硬材料国家重点实验室,长春,130012 Email: zhangl@pku.edu.cn

近年来,金属卤素钙钛矿材料在太阳能电池和发光二极管方面显示出了巨大的潜力,并取得了前所 未有的进展。压力工程作为一种有效的技术可以系统地调控功能材料的电子结构和物理化学性质。由于 金属卤素钙钛矿具有成分多样性和软的晶格的特征,施加外部压力可大幅度地调整其结构和性质。高压 工程已经对这类材料的结构-性质关系开展了深入的探索,极大地促进了此类材料的进一步发展。从多 个角度出发,我们着重研究了压力对金属卤素钙钛矿结构和光电性质的影响,发现了许多压力诱导的新 性质,包括压力诱导发光(PIE)、压致变色、自陷态激子的三重-单重态转换,半导体-金属转变等,同 时也探讨了在其高压研究中仍然存在的局限性和困境。高压工程不仅在原子级水平上精修晶体结构来阐 述其内在的结构-性质关系,而且能够发现许多新颖的或改善的光电性质,这为设计新型多功能金属卤 素钙钛矿材料提供了一条有前景的路径。

关键词: 高压; 钙钛矿; 光电性质

参考文献

- 1. Zhang, L.; Li, S.; Sun, H.; Fang, Y.; Wang, Y. et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62: e202311912.
- 2. Zhang, L.; Li, S.; Sun, H.; Jiang, Q.; Wang, Y. et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62: e202301573.
- 3. Zhang, L.; Liu, C.; Wang, L.; Liu, C; Wang, K.; Zou, B. Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57: 11213.

超越泡利极限的颗粒状 Ta-Te 超导纳米线

赵凌霄、赵毅、齐振博、应天平、贺文宇、齐彦鹏

上海科技大学物质科学与技术学院 Email: zhaolx2022@shanghaitech.edu.cn

摘要:

实现更高的上临界磁场(μ0Hc2(0))超导体对基础科学和实际应用均具有重要意义。尽管将二维(2D) 块体晶体减薄至数层可显著提升μ0Hc2(0)并伴随潜在的非传统配对机制,但进一步降至一维(1D)体 系时,其上临界场往往难以突破泡利极限。本研究中,我们报道了一种在高压下呈现超导特性的 1D Ta-Te 纳米线,其最高临界温度(Tc)达 5.1 K。尤为引人注目的是,该材料的μ0Hc2(0)高达 16 T,是泡利极 限的两倍,创下已报道超导纳米线中μ0Hc2(0)的最高纪录。这一发现为探索维度与μ0Hc2(0)间的内在机 制提供了理想平台,并有望在高磁场应用领域展现潜力。



图 1 本研究报导的 Ta-Te 纳米线与之前研究中报道的其他超导纳米线材料临界场与临界温度相图

关键词: 高压, 超导电性, 高上临界场

SrZn₂S₂0: Mn²⁺在快速压缩下的振荡力致发光与动态响应机制

赵婷婷1、王毫1、蒋升2、林传龙1

¹北京高压科学研究中心 ²中国科学院上海高等研究院

Email: tingting.zhao@hpstar.ac.cn

摘要:具有自恢复特性的力致发光(mechanoluminescence, ML)材料凭借其压力-速率依赖的发光特性, 在机械传感光电器件中展现出广阔应用前景^[1-3]。然而,压力与速率的耦合效应对 ML 动力学的影响机 制尚不明确,这制约了具有时间特性功能的 ML 光电器件设计。本研究发现在~1.7-4.7 GPa/s 临界速率 下,SrZn₂S₂O:Mn²⁺在 0.1-11.0 GPa 快速压缩过程中呈现独特的振荡 ML 行为,其时间依赖 ML 曲线出 现系列尖锐发射峰,与慢加压过程中宽缓发光峰形成鲜明对比,如图 1 所示。X 射线衍射证实 SrZn₂S₂O 基质在~14.6 GPa 以下保持结构稳定。光致发光光谱显示在 0.1-8.2 GPa 压力范围内,材料发光强度与波 长呈单调变化趋势。通过结合压电极化脱陷模型,我们认为临界速率的快速压缩下的振荡 ML 行为可能 源于发光中心在压电诱导下的多循环激发过程,这反映了材料对快速压缩的本征响应特性。这种速率依 赖的 ML 动力学差异可为具有时间分辨特性的 ML 器件设计提供新思路。



图 1 快速动态加载金刚石对顶砧(dDAC)装置及具有自恢复特性的 ML 材料 SrZn₂S₂O:Mn²⁺的力致发 光行为。在~0.7-11.0 GPa 压力范围内的快速压缩下,不同速率对 ML 强度随时间变化的瞬时响应曲线。 关键词:力致发光、高压、快速动态加载金刚石对顶压砧、加载速率、振荡发射 参考文献:

- Wang, X.; Zhang, H.; Yu, R.; Dong, L.; Peng, D.; Zhang, A.; Zhang, Y.; Liu, H.; Pan, C.; Wang, Z. L. Dynamic Pressure Mapping of Personalized Handwriting by a Flexible Sensor Matrix Based on the Mechanoluminescence Process. *Adv. Mater.* 2015, 27 (14), 2324–2331.
- Zhou, S.; Cheng, Y.; Xu, J.; Lin, H.; Liang, W.; Wang, Y. Design of Ratiometric Dual-Emitting Mechanoluminescence: Lanthanide/Transition-Metal Combination Strategy. *Laser Photonics Rev.* 2022, *16* (5), 2100666.

压力诱导的等对称性二级相变的机制

<u>钟启发</u>¹²、许金贵²、范大伟²、周文戈²

1 中国科学院大学; 2 中国科学院地球化学研究所 Email: zhongqifa@mail.gyig.ac.cn

摘要:

压力诱导的多型相变在基础物理、化学、材料科学和地球科学领域具有重要意义。等对称性相变的 独特之处在于其在相变过程中始终保持晶体对称性,并表现出一级或二级相变的特征。然而,压致等对 称性二阶相变的内在机制尚未得到充分阐释。本研究采用金刚石压腔结合同步辐射原位单晶 X 射线衍 射技术,在稀土矿物铈硅石(cerite)中发现了一例新的压力诱导等对称性相变。该相变由配位数增加 引发,并呈现二级相变的特征。结合前人的研究,我们系统梳理出五种压力诱导的等对称性相变类型。 进一步提出了由压力引起配位数增加所诱导相变(一级或二级)的理论机制:矿物晶体结构的复杂程度 对等对称性相变类型起决定性作用。具体而言,单一结构单元的晶体通常表现出一级相变特征,而具有 多重结构单元的晶体则展现出更高的结构适应性,更倾向于发生二级相变。本研究不仅为压力诱导配位 数增加引发的等对称性二级相变提供了新证据,更为深入理解压力诱导等对称性相变的微观机制提供了 重要的理论见解。

关键词: 等对称性相变, 配位数增加, 高压, 二阶相变, 相变机制

参考文献

 Zhong, Q., Xu, J., Zhang, D., Zhang, S., Wu, M., Gu, H., Zhou, Y., Fan, D. (2024) The mechanism behind pressure-induced isosymmetric second-order phase transitions. American Mineralogist, in press, doi: https://doi.org/10.2138/am-2024-9497.

高压下具有超导和超离子态的锂铋化合物

<u>周佩1</u>, 王晓梦1, 孙建2

1 宁夏大学物理学院 2 南京大学物理学院 Email: hanaol@foxmail.com

摘要:

高压下锂铋(Li-Bi)化合物的结构设计与物性研究为探索新型多功能材料提供了重要契机。本文 通过晶体结构预测与第一性原理计算,揭示了锂铋体系在 50-150 GPa 压力范围内的三种稳定相: Fm-3m Li₃Bi、R-3m Li₄Bi 和 P6/mmm Li₅Bi。其中,Li₄Bi 和 Li₅Bi 展现出独特的电子化合物(electride)特征, 其间隙准原子(ISQs)的局域化电子主导了金属性与超导性。电子-声子耦合计算表明,Li₄Bi 和 Li₅Bi 在 100 GPa 下的超导转变温度(Tc)分别为 5.8 K 和 6.5 K。此外,Li₄Bi 在 2400 K 时表现出超离子态, 锂离子通过跨层扩散实现快速迁移,而铋骨架保持固态:温度升至 3400 K 时体系完全液化。相比之下, Li₅Bi 为间接带隙半导体,其带隙随压力增大从 50 GPa 的 0.73 eV 扩展至 150 GPa 的 0.98 eV,展现出压 力可调的电子特性。研究进一步揭示了物性差异的微观机制:Li₄Bi 和 Li₅Bi 的电子化合物源于间隙电子 的强局域化,其超导性由锂原子振动与 ISQs 的电子耦合共同驱动;而 Li₄Bi 的超离子行为则归因于锂-锂短程相互作用与 ISQs 对扩散势全的降低。这些发现不仅拓展了高压下锂基合金的化学相图,还为极 端条件下多功能材料的设计提供了理论依据。【Phys. Rev. B. 111, 134109 (2025)】



图 1 R-3m Li4Bi 在 100 GPa 的超导态



图 2 R-3m Li4Bi 在 100 GPa 的超离子态

关键词: 晶体结构预测、第一性原理计算、超导电性, 超离子态

金刚石对顶砧中多环芳烃的高压单晶 X 射线衍射研究

周文居

北京高压科学研究中心 Email: <u>Wenju.Zhou@hpstar.ac.cn</u>

摘要: 多环芳烃(PAHs)是由两个或更多稠合苯环组成的有机化合物。因其独特的性质和广泛的应用, 长期受到地球科学家、化学家和物理学家的关注¹⁻²。压力作为一种强效的热力学参量,已被证实能诱 发影响材料性能的结构转变。而随着金刚石对顶砧(DAC)技术的进步,单晶 X 射线衍射(SC-XRD) 技术为探索有机晶体在高压条件下的晶体结构、平衡/非平衡转变路径、分子排列及化学键开辟了新途 径³。然而截至目前,PAHs 的 SC-XRD 结构研究压力上限仍停留在 2.1 GPa⁴。

本研究利用同步辐射 SC-XRD 技术,研究了四种典型 PAHs一萘、蒽、芘和苯并[a]芘(BaP)一在 DAC 中的高压行为。通过分析其压缩过程中的结构演变与化学键特性,我们发现: 萘和蒽分别在约 50 GPa 压力范围内未发生相变; 芘在 2.7 GPa 和 7.3 GPa 分别转变为芘-IV 和芘-V,并展现出前所未有的压缩 分子曲率; BaP 出现两种新相(BaP-II 和 BaP-III),理论计算证实 BaP-III 在 3.5 GPa 以上为最稳定相。本研究成果深化了对 PAHs 在极端条件下结构演化规律的认识,揭示了这类材料化学键的压致演变机制 及其高压结构稳定性。



图 1 萘、蒽、芘与苯并[a]芘的晶体结构。

关键词: 多环芳香烃、同步辐射单晶 X 射线衍射、金刚石对顶砧、高压 参考文献

- 1. Li, Q., Zhang, Y., Xie, Z. et al. Journal of Materials Chemistry C 10, 2411 2430 (2022).
- 2. Harvey, R. G. Polycyclic aromatic hydrocarbons, (Wiley-VCH, 1991).
- 3. Dubrovinsky, L. Single-crystal x-ray diffraction in the megabar pressure range. *High Press. Res.* 33, 451-583 (2013).
- 4. Fabbiani, F. P., Allan, D. R., Parsons, S. et al. Acta Crystallographica Section B: Structural Science 62, 826-842 (2006).

ANOMALOUS EXCITON BEHAVIOUR IN 2D BLACK PHOSPHORUS UNDER PRESSURE

Yang Lu^{1,2}

¹Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research, Shanghai, China; ²Shanghai Key Laboratory of Material Frontiers Research in Extreme Environments (MFree), Shanghai Advanced Research in Physical Sciences (SHARPS), Shanghai 201203, China

Black phosphorus (BP) has recently emerged as a promising two-dimensional (2D) semiconductor for excitonic nanodevices, primarily due to its direct bandgap, large exciton binding energy, and quasi-1D exciton nature. Pressure can effectively tune lattice parameters, particularly the interlayer coupling in layered 2D materials, thereby altering their properties and performance. In our studies, we discovered that the exciton energy and stability in 2D BP can be enhanced by pressure, which is contrary to its bulk-like counterpart. These observations can be quantitatively described by physical models involving the intra-and interlayer interactions. This work unveils previously unexplored pressure-induced phenomena in 2D BP, offering new insights for its excitonic applications.

Reference:

- [1] S. Huang, Y. Lu, et al. PRL 127, 186401 (2021).
- [2] P. Gong, L. Zou, et al. JPCC 121, 20931 (2017).
- [3] Y. Gao, et al. Phys. Rev. Research 6, 013267 (2024).
- [4] Y. Lu, et al. Under review.

高压下硫化硒的相变及电学性质研究

<u>胡蕙昕</u>、Israel Osmond、Calum Strain、Hannah A. Shuttleworth, Mikhail A. Kuzovnikov、

Eugene Gregoryanz, Miriam Pena-Alvarez, Philip Dalladay-Simpson, Ross T. Howie Email: ross.howie@ed.ac.uk

摘要:

在高压条件下,第六主族元素单质硫和硒均展现出丰富的相变现象,且在压力作用下会发生金属化并分别在 10.1-17.3 K (93-231 GPa)^{[1][2]}和 4-9 K (17-160 GPa)^[2]呈现超导电性。硫化硒作为同族元素化合物,在常压下具有更窄的带隙和较轻的平均原子质量,其常压结构与单质硫同构。然而,硫化硒在高压下的相变行为和电学性质尚未得到充分研究。本研究在 0-150 GPa 的压力范围内,对硫化硒的相变过程及电学性质进行了研究。通过同步辐射 X 射线衍射谱技术以及高压原位拉曼光谱技术,观察到硫化硒 经历了从八元环分子环 (I 相)向四方螺旋长链 (III 相)的相变过程,并且伴随金属化。进一步加压时,长链结构解离为调制结构 IV 相,该相具有相同的拉曼活性振幅模式,与单质硫、硒的 IV 相同构。在更高压力下,硫化硒相变为β-Po 型晶体结构 (V 相)。低温电阻测量表明, IV 相和 V 相具有超导电性。

关键词: 高压相变, 金属化, 硫化硒

参考文献

- Viktor V. Struzhkin, Russell J. Hemley, Ho-Kwang Mao, & Yuri A. Timofeev. (1997). Superconductivity at 10-17 K in compressed sulphur. *Nature*, 390(6658), 382-384.
- 2. Gregoryanz, E., Struzhkin, V. V., Hemley, R. J., Eremets, M. I., Mao, H.-K., & Timofeev, Y. A. (2002). Superconductivity in the chalcogens up to multimegabar pressures. *Physical Review B*, 65(6), 064504.

锑的不相称结构中由成键极性引起的链失序

赵博浩 1.2, 刘倍雷 2, 王越超 2*, 刘旭强 1, 陈彦龙 1, 徐远骥 3, 陈欣 2, 刘海

风2. 刘瑜2. 宋海峰2. 林传龙1*

1中国工程物理研究院北京高压科学研究中心 2北京应用物理与计算数学研究所计算物理全国重点实验室 3北京科技大学应用物理研究所

Email: bohao.zhao@hpstar.ac.cn

摘要:

在高压单质和化合物中经常观察到的非公度结构打破了我们对周期对称性和从周期晶格到非周期 性晶格转变路径的传统认识,也丰富了相变的原子运动机制和动力学认识[1,2]。就高压单质而言,公认 的非公度结构有两个不同的子晶格,它们相互嵌入,沿 c 轴的不相称晶格长度比(*c*_H/*c*_G)是一个无理 数[3]。因此,我们选择了具有代表性的主-客体(HG)非公度结构锑(Sb-II),从主-客体相互作用的角 度来研究其结构行为,特别是宽压力范围内的内相变和链失序。我们选择非公度的 Sb 单质作为研究对 象,从 host 和 guest 之间的相互作用研究其典型结构行为链失序的机理。

在非公度的主-客(HG)体系中经常观察到的链无序转变,在锑(Sb)中从未观察到过,而且对其 基本机制仍然知之甚少[4-6]。我们的 X 射线衍射结果表明,当从 12 GPa 减压到 90 K 的环境压力时, 非公度的 HG 结构 Sb-II 的 guest 结构转变为一种新的链无序结构,而 host 框架保持四面体结构,这与 室温下的结构演化不同。我们利用密度泛函理论模拟揭示了客体链的结构调制,从高压(>15 GPa)下 金属键的均匀分布,到常压下主客体成键极性增强的原子配对。低压下的原子配对和成键极化行为可能 是减压过程中客体链发生失序的根本原因。同时发现,有两种低频准声学支与压力引起的链无序和内相 变有关。这项研究加深了人们对通过主客体相互作用产生的 HG 结构演化的理解,为不相称结构相的 压力诱导行为提供了新的机理解释。

关键词: 非公度结构 调制 链失序 极性键 准声学支

参考文献

- [1] S. van Smaalen, Incommensurate Crystallography (Oxford University Press, 2007).
- [2] J. M. Hastings, J. P. Pouget, G. Shirane, A. J. Heeger, N. D. Miro, and A. G. MacDiarmid, Phys. Rev. Lett. 39, 1484 (1977).
- [3] R. J. Nelmes, D. R. Allan, M. I. McMahon, and S. A. Belmonte, Phys. Rev. Lett. 83, 4081 (1999).
- [4] A. L. Coleman, M. Stevenson, M. I. McMahon, and S. G. Macleod, Phys. Rev. B 97, 144107 (2018).
- [5] O. Degtyareva, M. I. McMahon, and R. J. Nelmes, Phys. Rev. B 70, 184119 (2004).
- [6] H. Iwasaki and T. Kikegawa, High Pressure Res. 6, 121 (2006).

专题代号: F

压力诱导 SHG 新纪录

<u>曲佳</u>、王弈铭、杨文革

北京高压科学研究中心 Email: jia.qu@hpstar.ac.cn, yangwg@hpstar.ac.cn

摘要:

SHG (Second-harmonic generation)是一种跨越光学、无线电、磁流体动力学乃至中层大气等多领域 的双频波与波非线性相互作用的现象。如何提高 SHG 转换效率,一直是 SHG 基础机理研究领域,以及 工业应用中亟需解决的关键问题。在非线性光学晶体中,激光 SHG 的强度由材料的二阶非线性极化率 主导,而晶格畸变被认为是影响其非线性响应的关键因素。近年来,卤化物钙钛矿因其独特的光电性能 和高度可调的晶体与电子结构,成为探索非线性光学特性的重要研究体系。这类材料表现出优越的非线

性响应,是开发新型光电器件的理想材料。我们的研究发现: CsGeCl₃在环境压力下的 SHG 响应 已达经典 KDP (KH₂PO₄)晶体(@1030 nm)的 9.1 倍。在高压作用下,SHG 强度显著提升,并在 1.07 GPa 处达到峰值,强度较初始值提高为 3.14 倍, 创造了高压条件下 SHG 响应的最新纪录。通过高 压下单晶角分辨偏振测量与粉末平均测试的对



比,验证了 CsGeCl₃的 SHG 系数的高度一致性,这为非线性性能的定量分析提供了可靠的交叉验证。 CsGeCl₃的 SHG 随压力演化呈现的穹顶行为,可通过[GeCl₆]八面体的结构畸变与 *ns*² 孤对电子效应予以 合理解释。进一步的能带结构计算与电子局域化函数分析揭示,随着压力增加,Ge²⁺ 孤对电子态的活 性伴随禁带宽度减小,是 SHG 增强的关键所在。我们的工作不仅加深了对卤化物钙钛矿非线性光学响 应机理的认知,也展示了压力在调控和提升非线性光学性能方面独特的优势。另外,我们所提出的综合 研究方法有望为新型光调制与光开关材料的设计与应用提供指导。

关键词: 高压; 非线性光学; 二次谐波产生; 单晶角分辨偏振测试; 拟合程序; 高压下晶体结构分析

参考文献:

^{1.} Jia Qu, Yiming Wang, Zhongyang Li, Mingtao Li, Tianyao Pei, Nana Li, Dequan Jiang, Bin Yang, Bing Li, Meiyan Ye, Pinwen Zhu, Yonggang Wang, Gang Liu, Xin Wang, and Wenge Yang. Origin of pressure-induced nonlinear optical property enhancement in CsGeCl₃ perovskite: [GeCl₆] octahedron distortion and band-gap closing. *Journal of the American Chemical Society*. 2025, 147, 8, 6717–6726.

Cu 单晶冲击结构演化的分子动力学模拟研究

安思敏, 高兴誉, 刘海风, 宋海峰

北京应用物理与计算数学研究所,北京市,100088

Email: ansm1014@126.com

摘要:

近来有冲击实验在 Cu、Ag、Au 等压标金属观测到 bcc 相[1-3],之前从未在同压力段的准静态加载实验中观测到 bcc 相,其背后的物理机制尚不清晰。我们采用分子动力学模拟研究了 Cu 单晶在不同加载取向([100][110][111])和加载强度(1.5-3.0 km/s)的冲击波作用下的动力学响应[4]。结果表明冲击雨贡纽和热力学相图难以反应冲击相演化,相变路径具有显著的取向依赖性。冲击波延[100]加载时,fcc-bcc 相变起始压力大约为 75GPa;延[110]加载时,大约在 120GPa 开始观察到明显的 bcc 相;延[111]加载时非常接近 fcc-bcc 热力学相界线 (~185GPa)。通过对比冲击雨贡纽和热力学相图可知,冲击波激发的新相主要表现为亚稳相,bcc 相的形成范围以[100]取向最大,[111]取向最小。

我们的研究揭示了冲击相变复杂的结构演化路径:(1)[100]取向: 高压区表现为单步 相变(fcc-bcc),低压区表现为两步相变(fcc-bcc-hcp);(2)[110]取向: 相变路径为 fcc - disorder - mixed phase,低压区的优势相随时间推移由 bcc 转变为 fcc,高压区的优势相为 bcc 相;(3)[111]取向: 在很宽的温压范围内表现为 fcc 相的自修复,只有在很高的压力下 发生熔化再结晶形成 bcc 相。

[100]取向的冲击相变服从经典马氏体相变的晶体学关系,冲击波直接作用于 fcc-bcc 相 变,[111]取向的冲击波则可以被矢量分解至 fcc 晶胞的 x-, y-, z-轴,导致晶胞边长同步缩短, 不利于 fcc-bcc 相变,这种行为类似于各向同性的准静态加载;同样的[110]取向的冲击波作 用于两个轴,更有利于破坏晶体结构,形成无序相助力 fcc-bcc 相变翻越能垒。我们的结果 阐明了冲击波作用下相界偏移的微观机制和物理背景,为亚稳相调控奠定了基础。

77



图 1. Cu 单晶冲击相变路径的取向依赖性

关键词:冲击相变;无序相;亚稳相;取向依赖

参考文献:

[1] S.M. Sharma, S.J. Turneaure, J.M. Winey, Y.M. Gupta, What Determines the fcc-bcc Structural Transformation in Shock Compressed Noble Metals?, Phys. Rev. Lett. 124(23) (2020) 235701.

[2] S.M. Sharma, S.J. Turneaure, J.M. Winey, Y.M. Gupta, Transformation of shock-compressed copper to the body-centered-cubic structure at 180 GPa, PhRvB 102(2) (2020) 020103.

[3] S.M. Sharma, S.J. Turneaure, J.M. Winey, Y. Li, P. Rigg, A. Schuman, N. Sinclair, Y. Toyoda, X. Wang, N. Weir, J. Zhang, Y.M. Gupta, Structural Transformation and Melting in Gold Shock Compressed to 355 GPa, Phys. Rev. Lett. 123(4) (2019) 045702.

[4] S. An, X. Gao, H. Liu, H. Song, Diverse kinetic pathways in shock-compressed phase transitions of a metallic single crystal, Materialia 38 (2024) 102245.

少层 2H-NbSe2 的高压拉曼光谱研究

吴海玲1、李璇1、赵凌霄21、刘影21*、朱金龙123*

物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心, 南方科技大学,深圳 518055 2) 粤港澳大湾区(广东)量子科学中心,深圳 518045

3) 新材料重大科学设施研院所,南方科技大学,深圳 518055

Email: zhujl@sustech.edu.cn

摘要:

2H-NbSe2 作为一种金属性质的过渡金属硫族化物,因其同时存在超导相和电荷密度波(CDW)而受到广泛关注。当层数减少到单层极限下, 二维 NbSe2 在继承了这些特征的同时又存在着截然不同的性质: 层数减小带来穿过费米面的能带减少^[1]、与体相比单层的 CDW 相显著增强^[2]、 超导性被抑制^[1]、并且随着层数的减少而出现伊辛超导^[3],这些性质的改变说明 NbSe2 层之间的相互作用对材料性能起着至关重要的作用。而 压力作为一种调控电子能带和原子振动有效的方法,已有研究表明压力会抑制 CDW 相^[4]并在 4.6 GPa 之后抑制超导相^[5]。

本研究通过高压拉曼光谱 (0-40 GPa)系统研究了薄层 2H-NbSe₂(3 层、4 层及 14 层)的晶格动力学行为。结果表明,所有振动模式 (剪切模、软模、A_{1g}和 E_{2g})均随压力增加发生蓝移,其中面外振动模式 A_{1g}的频移速率显著高于面内模式 E_{2g},这与 A_{1g}对层间压缩更敏 感的特性一致。值得注意的是, A_{1g}和 E_{2g}的蓝移速率与层数无关,表明高压下键刚度的变化主要由面内/面外化学键的压缩主导,而非二维限 域效应。与此同时,2H-NbSe₂ 对层间耦合十分敏感^[6],本实验通过分析低频段层间剪切模的半峰宽 (FWHM)揭示了压力、层数和电声耦合 (EPC) 强度的关系:常压下, 3、4 层样品的剪切模 FWHM 明显大于 14 层样品,而压力增大使少层样品的 FWHM 显著减小,14 层样品则几乎不 变。这一现象归因于少层样品中较弱的初始电声耦合在高压下因层间距离缩短而增强,而14 层样品因接近体相行为,EPC 变化不显著。此外, 拉曼光谱未出现新峰且频移曲线无斜率突变,证实薄层 2H-NbSe₂ 在高压下结构稳定,同块体 2H-NbSe₂ 相同未发生相变^[7],这为在同一结构中 研究 CDW 和超导随压力和层数演变提供了一个良好的材料平台。与此同时,本研究还为理解二维材料中电声耦合与层间相互作用的压力调控 提供了关键实验依据。



图 1 压力下薄层 2H-NbSe₂ 的频移和半峰宽 关键词: 高压、二维材料、电声耦合、NbSe₂

压力调控紫精 MOPs 电子转移路径的压致变色研究

王贺冲、隋琪、王霖

燕山大学理学院 Email: wanghechong@163.com

摘要:

In recent years, the phenomenon of pressure-induced color change in viologen materials has garnered significant attention due to its potential applications in pressure sensors^{1, 2}. This pressure-induced color change is not only related to luminescence³ but also combines aspects of conductivity^{4, 5} and magnetism⁶. Recently, we made an unexpected discovery: as pressure increases, samples with low free radical concentrations exhibit an exponential decrease in resistance under high pressure, while samples with high free radical concentrations maintain almost constant resistance. This unusual conductivity in crystalline molecular materials under high pressure has never been recorded before, challenging the traditional view that free radicals enhance conductivity Our research indicates that merely increasing the concentration of free radicals does not lead to an increase in the resistivity of violet materials. The exponential decline in resistivity of samples with lower free radical concentrations has piqued our interest in the structural changes occurring under high pressure.

Due to the remarkable capabilities of metal-organic framework compounds (MOFs) in various fields such as substrate detection, removal, storage, and gas separation, the electron-deficient porphyrin groups have been introduced as fundamental building blocks in the design of new MOFs. ⁷This has led to the synthesis of numerous multifunctional metal-porphyrin materials that exhibit color changes. To investigate the reasons behind the improved conductivity of low-concentration free radical viologen materials, we present a flexible one-dimensional(1D) Co ["] coordination polymer(1)derivedfrom 4,4'-bipydinum-1-1'-bis(phenylene-4-carboxylate) (bpybdc) to explore the formation of conductive pathways. We confirmed that the abrupt change in the bandgap of metal-viologen materials under high pressure is caused by the different responses to pressure in various directions of the 1 single crystal samples. Additionally, we are the first to discover the phenomenon of nonlinear negative compressibility in metal-porphyrin materials under high pressure.



Figure 1. (a) Optical images of 1 at select pressure. (b) In situ UV-vis absorption spectra of 1 during compression. (c) Variations of 1 band gap as a function of pressure. 关键词: Viologen、Piezochromic、Bandgap

高压室温压制法制备透明纳米羟基磷灰石生物陶瓷

胡开平、赵行斌、马帅领*、崔田*

宁波大学物理科学与技术学院 Email: 17280842505@163.com

摘要:近年来,纳米多晶羟基磷灰石陶瓷因其优异的力学与光学特性,被认为是可植入生物器件窗口的 理想材料^[1-2]。然而传统透明陶瓷烧结通常需要高温消除散射中心,这往往导致晶粒显著生长,形成粗 大的微米级晶粒,反而增强光散射并降低透明度^[3]。本研究探索了纳米羟基磷灰石(HAP)粉末在不依 赖温度的高压作用下的致密化过程。研究发现,仅靠高压即可引发并驱动纳米 HAP 压坯的致密化。当 压力超过 5 GPa 时,样品在红外和可见光波段均表现出高透明性和透光性。通过高压作用,无需外部热 源即可实现材料致密化。高压烧结技术具有抑制晶粒生长、促进块体纳米结构陶瓷形成的优势,能有效 保持初始颗粒的晶粒尺寸。室温高压压制为制备高致密纳米晶陶瓷提供了新途径,同时避免了晶粒过度 生长问题。



图 1 透明羟基磷灰石纳米陶瓷的光学图像

关键词:羟基磷灰石;透明陶瓷;高压处理;力学性能;致密化过程参考文献

- 1. M. Kalpana, R. Nagalakshmi, Appl. Biochem. Biotechnol. 2023, 195, 3994.
- 2. D.A. Florea, C. Chircov, et al. Appl. Sci. 2020, 10, 3483.
- 3. I. Borgh, P. Hedström, et al. Int. J. Refract. Met. Hard Mater. 2014, 43, 205.

高压调控与 CuS 掺杂协同提升 p 型 SnSe 晶体热电性能

胡开平、赵行斌*、崔田*

宁波大学物理科学与技术学院

Email: 17280842505@163.com

摘要: SnSe 因其独特的晶体结构、高功率因子和低热导率等特点,在热电应用领域展现出显著潜力。 本研究采用高温高压法,在 30 分钟内成功合成了 SnSe-x%CuS (x=0.1、0.3、0.5、0.7、1.0)多晶样品。 通过 CuS 掺杂,不仅显著提高了功率因子,同时有效抑制了晶格热导率,实现了电输运与热输运性能 的协同优化。具体而言:在高压作用下,载流子浓度提升增强了电导率;S原子有效占据 Se 位点调控 载流子浓度并优化功率因子;而 Cu 原子在 Sn 位点的引入通过声子软化效应降低了声子群速度,从而 抑制晶格热导率。高压处理进一步强化了声子散射作用,同时 SnSe 晶格振动频率的增加缩短了声子平 均自由程,使晶格热导率显著降低。最终,SnSe-5%CuS 多晶样品获得了~0.67 的峰值热电优值。该研 究为提升多晶 SnSe 热电性能提供了有效途径。



图 1 SnSe_{1-x}CuS_x (x = 0.01, 0.03, 0.05, 0.07, 0.1) 随温度的变化关系(a)电导率, (b)塞贝克系数, (c)功率因 子, (d)总热导率, (e)晶格热导率, (f)ZT 值

关键词:热电;高温高压;多晶 SnSe;晶格热导率

参考文献:

[1] S. Sassi, C. Candolfi, J.B. Vaney, V. Ohorodniichuk, P. Masschelein, A. Dauscher, B. Lenoir, *Appl. Phys. Lett.* 104 (2014) 212105.

液化气体的冲击压缩: 分子解离及样品/氟化锂界面处的辐射变化

<u>Muhammad Sabeeh Akram</u>^{1,2,3*},魏逸文^{1,3},范茁宁^{1,3},袁文硕^{1,3},杨雷^{1,3}, 刘其军^{1,3},刘福生^{1,3+}

¹西南交通大学物理科学与技术学院,中国教育部先进材料技术重点实验室,中国四川省 成都市 610031

2西南交通大学机械与航空航天工程学院,中国四川省成都市 610031

3西南交通大学高压科学与技术四川省重点实验室(高校),中国四川省成都市 610031

*通信作者电子邮件: Sabeeh@my.swjtu.edu.cn

+通信作者电子邮件: Fusheng 1@163.com

摘要:本研究通过冲击压缩实验研究了液化气体(Ar、O₂、CO和N₂)的行为特征 [1-4],重点分析了 温度变化与分子解离过程。实验采用多普勒探针系统(DPS)与高温计测量技术,获取了样品/氟化锂 (LiF)界面的冲击 Hugoniot 数据与温度变化特征。研究发现,在首次冲击作用下,分子液体在纳秒 时间内因压力、密度和温度的急剧升高而发生部分解离[5-7]。二次冲击时,除 Ar 外所有液体在界面处 均出现辐射强度下降现象,表明存在冲击诱导冷却效应[5,8,9]。这一现象揭示:当初始冲击压力超过 临界值引发解离后,界面处的二次冲击会促使系统吸收热能,从而导致温度(T₂)降低[10]。分析表 明,经历双重冲击的流体可能处于由原子、分子和聚合碎片组成的混合相态。因此,这种冲击冷却效 应并非氮气特有,也许在 O₂和 CO 体系中也同样存在。



关键词:冲击波,辐射测温,液化气体,冲击冷却

参考文献

1. J. Zheng, Q. F. Chen, Y. J. Gu, Y. L. Chen, L. C. Cai, and Z. J. Shen, "Multishock compression properties of warm dense argon," J. Chem. Phys. 140, 074202 (2014).

通过静水压对黄铜矿 $AgXTe_2$ (X = In, Ga)的热电性能进行双向优化

郭思琦、刘艳辉、崔田*

宁波大学物理科学与技术学院

Email: goooo47@163.com

摘要: 三元黄铜矿化合物 AgXTe₂ (X = In, Ga)因其独特的低对称性晶体结构和优异的热电转换效 率,长期以来一直是热电领域中的重要研究对象。然而,其热电性能仍不足以与传统热电材料(如 Bi₂Te₃) 相媲美。近年来,压力作为一种有效的外部调控参数,在优化热电性能方面的应用引起了广泛关注。本 研究基于密度泛函理论(DFT)结合三声子散射模型,深入揭示了黄铜矿 AgXTe₂体系在静水压力下的 反常热电响应机制计算结果表明,在晶格压缩条件下,AgXTe₂的晶格畸变与晶格热导率之间的关系呈 现出明显的反常行为——静水压力打破了两者之间原有的负相关性。此外,压力诱导的低频声子模软化 拓宽了低能声子带宽,其中 AgInTe₂的低能声子带宽从 30.1 cm⁻¹扩展至 41.1 cm⁻¹。该拓宽效应有效增加 了三声子散射通道的数量,从而导致晶格热导率显著降低。同时,本研究进一步构建了价键特性与晶格 非谐性之间的宏观关联,并提出压力驱动的电荷转移机制为晶格非谐性提供了间接的微观解释。值得关 注的是,尽管电输运参数间存在复杂的耦合效应,施加的静水压力仍然有效地提升了 AgXTe₂的功率因 子,其中 AgInTe₂最大增幅达到 2.1 mW·cm⁻¹·K⁻²。最后,AgXTe₂(X = In,Ga)的最大 *ZT*值分别增大了 58%和 11%,充分验证了压力调控作为提升热电性能的有效策略的可行性与潜力。



Compounds

图 1 AgXTe₂ (X=In, Ga) [本工作]、CuInTe₂^[1]、CuFeS₂^[2]、CuGaTe₂^[3]、SnSe、Cu₂Se、GeTe 和 CoSb₃^[4] 在常压和加压条件下的最大 ZT 值。常压结果用蓝绿色渐变表示,而压力调节结果用粉色表示。

关键词:静水压力、黄铜矿、热输运、热电性能

Pressure-Induced Spin Transition in Two-Dimensional Hoffman-Type Coordination Spin Crossover Compounds <u>Ruike Chai¹</u>, N.A. Liedienov^{1,2}, Quanjun Li¹ ¹State Key Laboratory of High Pressure and Superhard Materials, Jilin University, 130012

Changchun, China

²Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine

Email: chairk23@mails.jlu.edu.cn; nikita.ledenev.ssp@gmail.com; liquanjun@jlu.edu.cn

Abstract:

In recent years, the spin transition (ST) phenomenon has garnered significant attention due to its promising applications in spintronic and electronic devices. The alteration of spin states profoundly influences the physical and chemical properties of materials-such as their magnetic, thermal, electrical, mechanical, and photosensitive behaviors-rendering spin crossover (SCO) compounds highly attractive for use in memory storage, molecular switches, displays, and actuators [1]. This multifaceted utility has drawn widespread interest from researchers across physics, chemistry, and materials science. In this study, we investigate Hoffmann-type two-dimensional (2D) coordination polymers of the form $\{Fe^{2+}(L_{ax})_2[M^{2+}(CN)_4]\}$, where $L_{ax} =$ 4-methyl- or 4-ethyl-disulfanylpyridine, and $M^{2+} = Pt$ or Pd. External pressure was employed as a stimulus to induce STs in these compounds. Their functional properties were characterized using Raman scattering, infrared and visible absorption spectroscopy, X-ray diffraction, and magnetic susceptibility measurements. The spin transition temperatures $(T_{1/2})$ were determined to be 202 K for Fe²⁺(pyS₂Me)₂[Pt²⁺(CN)₄], 121 K for Fe²⁺(pyS₂Et)₂[Pt²⁺(CN)₄], and 137 K for Fe²⁺(pyS₂Et)₂[Pd²⁺(CN)₄]. Pressure-induced mixed spin states were observed in the ranges of 0.71-1.73 GPa, 0.70-1.95 GPa, and 0.52-1.10 GPa, respectively. Notably, all three compounds exhibited reversible spin transitions under pressure at room temperature, with full recovery of their functional properties upon pressure release. These findings provide valuable insights for the design of new SCO compounds with tunable ST temperatures for practical applications.

Keywords: spin-crossover, phase temperature, magnetic susceptibility, high-pressure physics, Hoffman-type compounds

Reference:

^{1.}Rubén Turo-Cortés, Francisco Javier Valverde-Muñoz, Manuel Meneses-Sánchez, M. Carmen Muñoz, Carlos Bartual-Murgui, José Antonio Real, "Bistable Hofmann-Type FeII Spin-Crossover Two-Dimensional Polymers of 4-Alkyldisulfanylpyridine for Prospective Grafting of Monolayers on Metallic Surfaces," Inorg. Chem., vol. 60, pp. 9040-9049, 2021.

基于压力带工程的非对称金属接触 MoS₂的增强和极性可切换光响应

陈淑欣

吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室 Email: chensx23@ mails.jlu.edu.cn

摘要:

对高效光电器件的需求不断增长,引发了对其性能调节策略的热烈探索。在此,我们展示了采用压力带工程策略的非对称电极 MoS₂光伏器件的光响应增强和极性切换。具体来说,Pt/MoS₂/Ag 的光响应从 2A/W (0.5 GPa)上升到 4A/W (2.3 GPa),显示出两倍的增强,同时在更高的压力下显示出连续的下降。令人难忘的是,在 Pt/MoS₂/Au 器件中,在 5.0 GPa 下观察到不寻常的极性开关行为,伴随着光响应的逐渐下降,这意味着它在逻辑门器件中的潜在应用。Pt/MoS₂/Ag 和 Pt/MoS₂/Au 器件中光响应的动态演变可以归因于 MoS₂在高压下的带隙、电子亲和能和功函数的变化,这些变化是由 MoS₂内部层间相互作用加剧引起的。这些发现验证了在压力下提高光伏器件性能的可行性,为探索、操纵和理解高效多功能光电器件开辟了新的途径。



图 1 非对称金属接触 MoS2器件中压力能带工程驱动的光电响应增强与极性切换

关键词:光伏效应,二硫化钼,不对称金属接触,高压

复杂体系新能源材料的结构探索

董洪亮、陈志强、束今赋

北京高压科学研究中心,上海,中国 Email: hongliang.dong@hpstar.ac.cn

摘要:

近来,随着"双碳"目标的提出,以及能源结构低碳化转型的持续推进,低碳排放甚至零碳排放的 新能源材料体系的研究,愈发受到重视,并逐渐升级为当下研究的热点。然而,与"谁与争锋"的性能 相比,能源材料体系的结构研究,尤其是服役环境(温度、压力等)中复杂体系动态结构响应的研究不 甚充分,这里我们将就热电、光伏、电催化等一系列新能源材料体系的结构研究予以总结,并探究其高 效、稳定背后的结构原因,通过结构描述符的构建,为新能源材料的设计与应用提供理论指导。

关键词:新能源材料、同步辐射、TEM、结构描述符 参考文献(中文小五号宋体,其中英文和数字为Times New Roman 小五号字)

- 1. Guo et al., Advanced Materials, 2500224 (2025). https://doi.org/10.1002/adma.202500224
- 2. Shang et al., Advanced Science, 2417550 (2025). https://doi.org/10.1002/advs.202417550
- 3. Yue et al., Science 388,430-436(2025).
- 4. Li et al., Nat Commun 16, 2246 (2025).
- 5. Zhang et al., Nat Commun 16, 98 (2025).
- 6. Deng et al., Nat Commun 16, 656 (2025).
- 7. Chen et al., Advanced Materials, 37(18), 2502526 (2025).
- 8. Han et al., Chemical Engineering Journal, 509, 161095 (2025).
- 9. Li et al., Advanced Materials, 37(3), 2410338 (2025).
- 10. Wang et al., Chem, 11,3,102325 (2025).

低维铅基金属卤化物的压力诱导发光增强研究

<u>房媛媛</u>

聊城大学物理科学与信息工程学院 Email: fangyuanyuan@lcu.edu.cn

摘要:

金属卤化物材料作为一种新型光电材料,因其优异的光电性能,在光伏、发光二极管、探测器等领 域具有广阔的应用前景。低维铅基金属卤化物晶体作为低维金属卤化物中最具代表性的一类,结构上具 有较强的量子限域特性、较高的稳定性和较大的可调控性,使其受到了科研人员的广泛关注。然而,这 类材料中的间隔阳离子会在低维金属卤化物中形成绝缘层,阻碍载流子的传输,导致荧光量子产率低。 深入研究晶体结构与发光行为之间的内在联系并有效调控其发光性能已经成为低维金属卤化物材料研 究领域亟待解决的关键科学问题。

常压下只有微弱荧光的(2meptH₂)PbCl₄在 2.1 GPa 的压力作用下出现了大幅度的荧光增强,并且荧 光强度持续增强直到 9.9 GPa。当压力达到 2.1 GPa 时,样品体积沿着有机层方向出现了明显塌缩,晶体 结构内的扭曲程度加剧,引起了自陷态发光效率的提升和荧光强度的大幅增加。通过理论计算模拟,对 其微观结构、自陷态激子的辐射和非辐射复合等行为进行了分析。计算结果表明 2.1 GPa-9.9 GPa 范围内 的压力对非辐射损失产生了抑制作用并促进了辐射复合,使得样品的荧光强度提高了 190 倍以上。同时, 通过压力对样品荧光颜色的的调控,使其始终发射"暖"白光。因此,这一结果不仅可以深入认识低维 金属卤化物材料的结构-性质关系,还能够为获得具有高效荧光性能的低维铅基金属卤化物材料提供新 思路。



二维层状半导体 CrPS4 中光电效应巨幅增强的压力定制相工程

冯俊铭、马帅领*、戚梦瑶、崔田*

宁波大学物理科学与技术学院 Email: 2311690088@nbu.edu.cn

摘要:

二维(2D) 层状金属磷三硫化物 (MPTs) 是开发先进光电探测器的有前途的半导体材料。然 而,它们的低光电转换效率限制了它们在遥感、光通信、成像、安全控制等方面的应用。因此,不断探 索优化 MPTs 的光电性能对于推动光电子行业发展至关重要。在此,我们介绍了一种新颖的、有前途 的策略,通过高压相工程提高 2D 多层半导体 CrPS4 材料的光电性能。通过施加压力,CrPS4 的光响 应在 6 GPa 以上显着增强。光电流密度 (*J*_{ph})、响应度 (*R*) 和外部量子效率 (EQE) 在 13 GPa 左右达到最大值,与初始值相比,显著增加了 6 个数量级。这些有趣的增强功能与 CrPS4 从常压 C2 相到高压 C2/m 相的压力诱导转变直接相关,表现出更好的光电性能。我们的研究结果提供了一种可 行的策略,可以通过压力定制相位工程来优化此类半导体材料的光电性能,为开发高性能光电探测器器 件提供了一种新的策略。

关键词: 高压工程;光电性能增强;相变;CrPS4 半导体;压力诱导相变 参考文献

- 1. Zhang, J.-B.; Tian, Y.-B.; Gu, Z.-G.; Zhang, J., Nano-Micro Lett. 2024, 16, 253.
- 2. Cao, F.; Liu, L.; Li, L., Mater. Today 2023, 62, 327-349.
- Meng, X.; Du, Y.; Wu, W.; Joseph, N. B.; Deng, X.; Wang, J.; Ma, J.; Shi, Z.; Liu, B.; Ma, Y.; Yue, F.; Zhong, N.; Xiang, P. H.; Zhang, C.; Duan, C. G.; Narayan, A.; Sun, Z.; Chu, J.; Yuan, X., Adv. Sci. 2023, 10, 2300413.

氮化铝陶瓷的制备、表征和应用

龚发1、贺端威1,2

1.四川大学原子与分子物理研究所 2.四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室 E-mail: 623312951@qq.com

摘要:

AIN 是强共价化合物,原子的自扩散系数小,因此,纯 AIN 粉末需要在较高的烧结温 度下(高于 1800℃)烧结致密化。大量的研究表明,为了降低 AIN 的烧结温度、加速烧结 致密化,提高 AIN 陶瓷的热导率,通常选择添加碱土或稀土金属氧化物(Y2O3、CaF2等) 作为烧结助剂。本研究系统地研究了在高压烧结下,粒度、烧结温度和烧结时间对未添加烧 结助剂的 A1N 粉末的热导率的影响以及添加不同比例金刚石作为导热填料对 AIN 热导率的 影响。结果表明:(1)随着烧结温度的增加,AIN 陶瓷的相对密度逐渐增加。AIN 粉末在 5GPa、1400℃下烧结 10min,A1N 陶瓷的相对密度达到 98.32%,AIN 热导率为 101.51 W·m⁻¹ K⁻¹。 (2)随着导热填料金刚石体积比的增加,AIN 烧结体的的相对密度几乎不变,约为 98%, 然而,热导率随着金刚石体积比的增加而逐渐增大。当 AIN 与金刚石的体积比为 2:1,在 5GPa、1300℃下 A1N 烧结体的热导率为 98.58 W·m⁻¹ · K⁻¹。

目前在高压下烧结 A1N 陶瓷的研究较少,本研究旨在为 AIN 陶瓷材料以及其他非氧化物陶瓷材料制备提供思路;通过添加高导热填料金刚石研究 AIN 陶瓷的高压烧结行为、显微结构和导热性能的影响。

关键词: AIN 陶瓷; 金刚石; 高压烧结; 热导率

参考文献:

- Ji P, Lu X. Microstructure and thermal conductivity of nano-carbon/AlN composites[J]. Diamond and Related Materials, 2022, 121: 108710.
- Chen Z, Wang L, Du P, et al. Effects of different sintering additives Re2O3 (Re= Y, Nd, Gd, Sm, and Yb) on the thermal conductivity, mechanical properties and dielectric properties of AlN ceramics[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2025, 1023: 180180.
- Du X, Qin M, Farid A, et al. Study of rare-earth oxide sintering aid systems for AlN ceramics[J]. Materials Science and Engineering: A, 2007, 460: 471-474.

高压下无铅双钙钛矿 Cs₂AgInCl₆的结构和光电性能研究

郭宏伟、李会*、连敏*、崔田*、

广西民族大学,物理与电子信息学院,530006 宁波大学,物理科学与技术学院,315211 Email: yunchuli@126.com

摘要:

环境友好的无机无铅双钙钛矿材料因其具有由于优异的光电特性,被认为是铅基钙钛矿材料的良 好替代品之一。本文采用水热法制备了一种非铅双钙钛矿材料 Cs₂AgInCl₆,利用金刚石对顶砧装置进行 高压实验,研究了室温下压力诱导 Cs₂AgInCl₆的结构变化以及压力对其光电流、光学带隙的调控,实验 最高压力为 41.1GPa。原位高压拉曼及同步辐射 X 射线衍射实验结果显示, 8.9 GPa 时 Cs₂AgInCl₆ 发生 了从立方相(Fm-3m)到四方相(I4/m)的相变。原位高压吸收光谱显示带隙在相变前后随压力呈现反 向变化趋势。当压力增加到实验最高点时,光电流值为常压值的两倍,且卸压后依然保持。本研究揭示 了压力调控下的无铅双钙钛矿材料结构-性能关联机制,为通过晶体工程与应变调控优化光电性能提供 了可行策略。压缩后功能的有效保留凸显了此类材料在非易失性压力可调谐光电探测器中的应用潜力。



图 1 (a)常压下 Cs₂AgInCl₆在不同光波长下的光响应图谱; (b)光波长为 450_nm, Cs₂AgInCl₆在不同压 力下的光响应图谱; (c, d, e) Cs₂AgInCl₆的光电流密度(*J*_{PH}),光响应强度(R)和外部量子效率(EQE)随 压力的变化趋势; (f) I-V 曲线随压力的变化趋势。

关键词:无铅卤化物双钙钛矿、光电性质、高压调控、结构相变

资助项目: 广西自然科学基金资助(项目任务书编号: 2024GXNSFAA010184, 2025GXNSFAA069649)

参考文献:

1. Li Q, Wang Y, Pan W, Yang W, Zou B, Tang J, Quan Z 2017 Angew Chem Int Ed Engl 56 15969

两种叠氮化物的高温高压相变及其稳定性研究

郭旭1. 张盈1. 王鹏1,*, 刘冰冰1,*

¹吉林大学物理学院-高压与超硬材料全国重点实验室,长春 130012 *Email: wangpengtrrs@jlu.edu.cn *Email: liubb@jlu.edu.cn

摘要:

无机叠氮化物因其独特的结构和物理化学性质,被广泛应用于推进剂、炸药和低温摄影等工业和军 事领域。叠氮化物的叠氮基团由三个氮原子线性相连,彼此通过双键键合,使其成为高压下研究复杂化 学键的理想模型体系,此外,相较于 N₂ 分子解离所需的巨大能量壁垒,碱金属叠氮化物等被理论认为 是合成聚合氮材料的重要前驱体,其高压研究引起了广泛的研究兴趣。这里我们对两种常见的叠氮化物 (叠氮化钠 NaN₃和叠氮化铵 NH₄N₃)进行了高温高压研究。对 NaN₃研究表明,在5 GPa,450 K 条件下 退火处理后,NaN₃成功转变为*I4/mcm*结构。其拉曼光谱显示,该结构至少在 2 – 66 GPa 的压力范围内 表现出良好的结构稳定性,与其α相明显不同。对 NH₄N₃的研究显示,直接压缩 NH₄N₃至 50 GPa 即可 诱导其聚合生成 NH₄N₅。450 K 条件下退火可以增加 NH₄N₅产率,所获得的 NH₄N₅样品可以卸压保存 到近环境压力条件。本工作揭示了温度-压力对叠氮化物高压相变路径的协同调控作用,实现了 *I4/mcm*-NaN₃新相和 NH₄N₅的高压合成。



图 1 (a) 不同结构 NaN₃ 的拉曼光谱图; (b) NH₄N₅ 的拉曼峰位随压力依赖曲线图 关键词:叠氮化钠;叠氮化铵;高压;相变;拉曼光谱 参考文献:

1. D. Li, P. Zhu, J. Jiang, D. Xu, R. Liu, X. Wang, Q. Cui, H. Zhu, J. Phys. Commun. 1 (2017), 025002.

压强下 WSe₂光电性能的调控

姜懿峰1

¹吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: yfjiang23@mails.jlu.edu.cn

二维过渡金属二硫族化合物由于其显著的电子和光电性能为发展光电探测器提供了巨大的潜力。通 过利用 2D 材料的特殊性质,例如它们可调带隙的、大的电荷载流子迁移率和可调谐的电子结构,可以 获得高效的光电探测器^[1]。压强作为一种"干净"的手段,可以有效的调节层间距离和层内相互作用。 通过压强改性的层状材料展现出更加丰富和优异的物理化学特性,极大的扩展了层状材料的研究领域。 由此可见,压强在提高光电探测器性能方面存在巨大的潜力。WSe2 作为 TMD 家族的一员,常温常压 下性质稳定^[2],其电子结构工程允许人们探索该材料的特性及通过层数调控可以由间接带隙半导体转为 直接带隙半导体,允许人们探索在光子器件中的潜在应用,并有助于开发实用的光电器件。我们通过引 入压强这种"干净"的手段,有效调节了 WSe2 的层间距离,从而实现了带隙的调控,通过压强改性的 WSe2 显示出了在氙灯照明下光电流随压力增加再逐渐变大,最终在 24GPa 的压强下光电流提高了 2 个 数量级,电阻下降了 4 个数量级,响应时间维持在数十微秒,光电流密度和响应率提升 1 个数量级。并 且随着压强的提升,WSe2 的光电响应范围扩展到 1450 nm,而且随着压力的提升,其红外光电响应也得 到了显著改善。这为 WSe2 在制备成高性能光电探测器提供了一个更全面的见解。



图 1 WSe2 光电流、光电流密度、响应度以及电阻随压强变化

关键词: 高压; 过渡金属二硫族化合物; 光电探测器 参考文献

[1] Ahmed A, Iqbal M Z, Dahshan A, et al. Recent advances in 2D transition metal dichalcogenide-based photodetectors: a review[J]. Nanoscale, 2024, 16(5): 2097-2120.

[2] Liu B, Han Y, Gao C, et al. Pressure induced semiconductor-semimetal transition in WSe2[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2010, 114(33): 14251-14254.
KZn1-xMnx(PO3)3荧光材料的晶体结构调控及高压发光特性

蒋佳月、 王毫、 赵婷婷、 李晓东、 林传龙、 李延春

中国科学院大学高能物理研究所、北京高压科学研究中心 Email: liyc@ihep.ac.cn

摘要:

近年来,磷酸盐基荧光材料因其丰富的结构、优异的光学特性和环境友好型等特点,在白光 LED 和光学传感器等领域展现出重要的应用价值。[1-2]作为该类材料的典型代表,KZn1-xMnx(PO3)3被发现在 不同合成温度下可获得两种晶体相,且独特的[ZnO6]/[MnO6]八面体与[PO3]∞链/P3O9环组成的框架结构 使得 Mn²⁺离子在材料中产生红色的宽域发光。[3-4] 然而,如何精确调控合成条件实现该材料的多晶相 可控制备仍不清晰。此外,外部场效应 (压力) 对该材料的多晶相发光性能调控仍存在研究空白。本研 究以 KZn1-xMnx(PO3)3 荧光材料为研究体系,采用高温固相反应法,通过系统调控合成温度(400-1000 °C) 与 Zn/Mn 化学计量比(x = 0-1), 成功实现了 α 、 β 和非晶 (Am) 三相的可控制备,并结合 X 射线衍射 (XRD) 和扫描电子显微镜 (SEM) 等表征手段揭示了相组成与合成参数的关联规律。[5] 进一步,结合 金刚石对顶砧 (DAC) 高压技术和原位荧光光谱技术,研究了压力作为有效外场参量对三种相结构的发 光性能的影响。结果表明,压力可诱导三种相产生显著的荧光红移 (Δλ>60 nm) 和半高宽展宽 (ΔFWHM>40 nm)效应,使发光颜色实现从橙红色 (~600 nm) 到深红色 (~700 nm) 的宽域连续可调。特 别值得注意的是,通过 DAC 系统与光电子计数器的联用,首次发现β相在 7.8 GPa 高压下表现出余辉寿 命延长的现象,推测这一现象可能源于压力诱使晶格缺陷增多,形成更深/更多的陷阱能级,从而延缓 载流子的释放过程。本研究建立了多晶相 KZn1-xMnx(PO3)3 荧光材料的"合成-结构-性能"的调控范式, 不仅为磷酸盐基荧光材料的相工程提供了新思路,还揭示了压力对磷酸盐类 Mn²⁺发光的独特调控以及 压力诱导余辉增强效应,为发展智能光学器件和压力传感材料奠定了了实验基础。

关键词: KZn_{1-x}Mn_x(PO₃)₃荧光材料;多晶相调控;高压荧光调控;高压余辉寿命增强 参考文献

- L. Wu, S. Sun, Y. Bai, Z. Xia, L. Wu, H. Chen, L. Zheng, H. Yi, T. Sun, Y. Kong, Y. Zhang and J. Xu, *Adv. Opt Mater.*, 2021, 9, 2100870.
- 2. D. Zhao, S. Zhu, R. Zhang, Q. Yao, W. Liu and Y. Xue, *Inorg Chem.*, 2021, **60**, 17942-17951.
- H. Chen, L. Wu, F. Bo, J. Jian, L. Wu, H. Zhang, L. Zheng, Y. Kong, Y. Zhang and J. Xu, *J. Mater. Chem. C.*, 2019, 7, 7096.
- 4. A. ELABIAD, M. MESNAOUI, H. AOUAD, M. MAAZAZ and I. BELHAROUAK, *Phosphorus Res. Bull.*, 1999, 10, 393.

基于超快压缩的 Grüneisen 参数测量及物态方程研究

孔君^{1,2}、苏磊^{2,3}、董校¹

¹南开大学物理科学学院,天津,300071 ²北京高压科学研究中心,北京,100093 ³上海前瞻物质科学研究院,上海,201203 Email: xiao.dong@nankai.edu.cn; lei.su@sharps.ac.cn

摘要:

格林艾森参数对于确定材料的热力学性质,包括材料的非简谐效应、平衡态热力学和状态方程等具有非 常重要的意义。然而,在高压条件下实现直接准确测量格林艾森参数所需的等熵过程相对困难。本工作 中,我们利用自主设计的动态加载金刚石对顶砧和原位诊断系统,在 0.5 毫秒内实现压力的快速加载, 实现了对材料的准等熵压缩,同时测量其温度变化。我们应用此设备测量了宽压力范围下氯化钠的格林 艾森参数。Hugoniot 曲线对于分析冲击加载过程中材料的动态压缩性质具有重要的意义。根据得到的氯 化钠的格林艾森参数,我们还计算了其 B1 相的 Hugoniot 曲线,与 Fritz 等人报道的结果一致。因此, 我们的结果显示这种新方法对于测定更多物质的格林艾森参数是十分可靠的,对于进一步研究物质的状 态方程以及其他热力学性质具有十分重要的意义。



图 1 (a) Schematic illustration of the programmable automatic high pressure jump and temperature detection apparatus. (b) A typical record of temperature and pressure for sodium chloride before and after the pressure

jump. (c) The Grüneisen parameters versus pressure. (d) The pressure along the Hugoniot curve.

关键词: Grüneisen 参数;动态压缩;等熵过程 参考文献

 Kong J, Shi K, Dong X, et al. Expanding the Pressure Frontier in Grüneisen Parameter Measurement: Study of Sodium Chloride[J]. Physical Review Letters, 2023, 131(26): 266101.

专题代号: A

氨水合物的高压相变研究

蒲梦琼、李新阳、苑晓美、耿延雷、欧阳伊萍、王晨璐、张家诚、李亮、 <u>李芳菲</u>、周强

吉林大学,物理学院,高压与超硬材料全国重点实验室,综合极端条件高压科学中心 Email: lifangfei@jlu.edu.cn

氨水合物在高压下的相变行为研究对于了解和模拟冰行星的内部组成及演化过程具有重要意义 [1]。近年来,氨水合物的高压研究主要集中在二水合氨(NH₃·2H₂O, ADH)、一水合氨(NH₃·H₂O, AMH) 和半水合氨(2NH₃·H₂O, AHH)[2-4]。第一性原理计算预测了一种新的富氨水合物,即四分之一水合氨 (4NH₃·H₂O, AQH)[5],但目前还没有关于 AQH 高压结构的实验研究。因此,我们利用拉曼散射光 谱和 x 射线衍射技术初步研究了 AQH 在 33.8 GPa 压力范围内的相变行为。发现 AQH 在高压下共经历 四个相变。在 2.8 GPa 时,液态 AQH 转化为固态 AQH-II 相,单晶 XRD 结果显示其具有 *P*2₁/*c* 空间群, 氨分子和水分子随机占据晶格的位点。在 14.6 GPa, P-V 关系保持连续变化,但 a/c 轴比出现明显的斜 率变化,表明 NH₃分子可能发生重排,导致 AQH 相变为 AQH-II';在 20.4 GPa,晶体的轴比再次出现 转折,且结合拉曼光谱中 OH 振动峰的出现,表明 NH₃ 分子发生电离产生离子-分子相(AQH-II'-ionic)。 在 26.4 GPa 以上,转变为立方的无序离子分子合金相(AQH-DIMA)。



图 1. AQH-II 相的特征拉曼光谱和 XRD 衍射谱

关键词: 高压, 拉曼, X 射线衍射, 氨水合物, 相变 参考文献:

- 1. K. Ohta, Nat. Phys. 19, 1227 (2023).
- 2. B. Massani, C. G. Pruteanu, L. J. Conway, V. N. Robinson, A. Hermann, and J. S. Loveday, Crystals 12 (2022).
- L. Andriambariarijaona, F. Datchi, H. Zhang, K. Béneut, B. Baptiste, N. Guignot, and S. Ninet, Phys. Rev. B 108, 174102 (2023).
- 4. X. Li, W. Shi, X. Liu, and Z. Mao, Am. Mineral. 104, 1307 (2019).
- 5. V. Naden Robinson, M. Marques, Y. Wang, Y. Ma, and A. Hermann, J. Chem. Phys. 149, 234501 (2018).

ReS2 光电特性的压力调控研究

李明璇

吉林大学物理学院 Email: mxli23@mails.jlu.edu.cn

近年来,二维过渡金属二硫族化合物(TMDs)因其独特的结构和优异的性能而受到越来越多的关注。 ReS2作为TMDs家族的新成员,由于其异常扭曲的八面体晶体结构而具有三斜对称,因此具有许多独特的特征。其独特的光电特性成为热门硅电子领域的理想材料之一。我们对ReS2高压下的结构、振动特性以及光电性质进行研究,大约在 6.1GPa 左右 ReS2由常压下扭曲的 1T 相转变为高压下扭曲的 1T'相。高压下原位拉曼光谱表明,层间 S-S 的相互作用在压缩过程中大大增强,在压强逐渐增加后逐渐形成 S-S 键,再进一步压缩后,ReS2带隙逐渐闭合,由半导体逐渐转变为金属相。在 0.8V 的偏压下,ReS2的光响应随这压强的增加大大增强,呈逐渐上升的状态,本研究可证明压力在调节材料性能中起到关键作用,以及层状过渡金属二硫族化合物在压力响应光电子应用的潜在用途。



图 1 光电流响应随压力的变化

关键词: ReS2、光电效应、高压

参考文献

1. Wang P, Wang Y G, Qu J Y, et al. Pressure-induced structural and electronic transitions, metallization, and enhanced visible-light responsiveness in layered rhenium disulphide [J]. PHYSICAL REVIEW B, 2018, 97(23)

自旋交叉化合物的压卡效应研究

<u>李瑞鑫</u>

聊城大学物理科学与信息工程学院 Email: liruixin@lcu.edu.cn

近年来,基于外场驱动的固态相变制冷技术被认为是一类最有希望取代传统蒸汽压缩制冷技术的制 冷方式。其中,静水压力驱动的压卡制冷技术由于优异的热效应受到研究者们的广泛关注。自旋交叉化 合物凭借较小的滞后宽度和较高的压力敏感性适用于低驱动压力制冷环境。但是,大多数自旋交叉化合 物的制冷温区偏离室温不利于实际制冷应用。本工作,通过配体修饰的手段调控 Fe(II)离子的配位场强 度,获得了一种在冰点附近展现出突变型自旋转换行为的自旋交叉化合物[FeL(NCS)₂] (PRF; L=N¹, N³-bis((1-(3-(3-fluoropropyl)-1H-1,2,3-triazol-4-yl)methylene)-2,2-dimethylpropane-1,3-diamine))。通过准直 接法探究此化合物的压卡效应发现,在1kbar 驱动压力下 PRF 的可逆等温熵变和可逆绝热温度变化的 最大值分别为~114 J kg⁻¹ K⁻¹ 和~16 K。与 BCE 研究中已报道的 SCO 化合物相比,PRF 表现出非常高的 制冷效率,CRP 为 2.1,这是因为在压力作用下此化合物的自旋转换类型从"单步"转变为"两步"自 旋转换增大了压力驱动的可逆绝热温度变化。



图 1 自旋交叉化合物 PRF 的压卡效应对比

关键词:压卡效应,静水压,固态相变制冷,自旋交叉化合物 参考文献

- 1. Seredyuk M, Li R, Znovjyak K, et al. Advanced Functional Materials 2024, 34(30): 2315487.
- 2. Li B, Kawakita Y, Ohira-Kawamura S, et al. Nature 2019, 567(7749): 506-510.
- 3. Romanini M, Wang Y, Gürpinar K, et al. Advanced Materials 2021, 33(10): 2008076.
- 4. Seo J, Braun JD, Dev VM, et al. Journal of the American Chemical Society 2022, 144(14): 6493-6503.
- 5. Piper SL, Melag L, Kar M, et al. Science 2025, 387(6729): 56-62.

专题代号: A

压力增强二维金属磷硫族化合物半导体 SnPSe₃的光电性质

李世新、戚梦瑶、马帅领、崔田*

宁波大学物理科学与技术学院学院 | 高压物理科学研究院

Email: 2411690111@nbu.edu.cn

摘要: 以金属磷硫化合物(MPTs)为代表的二维半导体材料的压力工程已经成功地诱导了自旋交叉、体 积塌陷、压致变色、金属化和超导等多种新颖的物理现象。作为 MPT 家族的典型成员, SnPSe₃表现出 异常的压力响应,如结构相变、带隙收缩、金属化和超导等。然而,目前缺乏对压力下光电性能的研究, 这可能会促进对高性能 MPT 基光电探测器的探索。在这里,通过引入压力,SnPSe₃的光电性能得到了 显著的改善,具有高的光电流密度 J_{ph} (8.6×10⁴µA cm⁻²),响应度 R (4.2×10⁵µA W⁻¹)和外量子效率 (EQE)(8.4×10⁵),与初始值相比,几乎提高了三个数量级。结合高压紫外-可见吸收和拉曼光谱测量, 以及电子能带结构、电子局域函数 Bade 电荷等理论计算,发现压力增强的光电性能主要与 P-P 原子和 P-Se 原子之间原子间距离的减小和原子间相互作用的增强有关,这促进了电荷转移,最终导致压缩 Sn PSe₃的光电流增强。SnPSe₃中压力增强光电子学性质的发现为调控光电性质提供了一种有效的手段, 激发了人们对二维半导体新性质的探索。



图 1.(a)10.7GPa 下 SnPSe₃ 的光电流 (b)压力下 SnPSe₃ 的光电流密度和响应度 (c)压力下 SnPSe₃ 的外量 子效率

关键词:光电增强、光电流密度、响应度

1. K.-Z. Du, X.-Z. Wang, Y. Liu, P. Hu, M. I. B. Utama, C. K. Gan, Q. Xiong and C. Kloc, ACS Nano, 2015, 10, 1738–1743.

2. J. Lee, T. Y. Ko, J. H. Kim, H. Bark, B. Kang, S. G. Jung, T. Park, Z. Lee, S. Ryu and C. Lee, ACS Nano, 2017, 11, 10935–10944.

3. Y. Li and D. J. Singh, Phys. Rev. Mater., 2017, 1, 075402.

压力诱导 CuInP₂S₆-ReS₂异质结的体光伏效应增强

李树聪1李全军1

¹吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: scli23@ mails.jlu.edu.cn

体光伏效应(Bulk Photovoltaic Effect, BPVE)是一种二阶非线性光电响应,指在非中心对称晶体结构中,在均匀光照下无需外置偏压即可产生稳态光电流的现象[1,2]。由于 BPVE 的电荷分离机制源于 非中心对称结构所产生的自发极化,这不仅有助于简化器件结构,还有望突破 Shockley-Queisser 理论 效率极限,提高光伏电池的转化效率[2]。二维范德瓦耳斯(vdW)层状材料因其原子级厚度和表面无 悬挂键的特性,为在界面或表面处打破对称性提供了新途径。通过精确堆叠二维材料,形成具有特定取 向的多层结构或异质结,可以有效破坏晶体的固有对称性,诱发面内或面外自发极化[3]。因此,选取

典型二维功能材料,通过外场调控与异质结工程等手段,构建新型光伏材料体系并探究其体光伏特性增强机制具有重要科学意义。在此,我们利用 CuInP₂S₆ (CIPS)和 ReS₂,在金刚石对顶砧中成功搭建二 维铁电异质结,以研究压力可调的体光伏效应。结果表明,在 0.3 GPa 时,该器件表现出 0.5 V 的开 路电压 (Voc)和 24 nA 的自驱动光电流。值得注意的是,在 3-6 GPa 的压力下,开路电压增加到 0.55 V,光电流达到 200 nA。这将推动二维材料在新型高性能光电探测器和光伏器件中的应用探索,为实 现器件性能的突破提供创新性的实验和理论支持。



关键词: 高压; 异质结; 体光伏效应

参考文献

[1] Dai Z, Rappe A M. Recent progress in the theory of bulk photovoltaic effect [J]. Chemical Physics Reviews, 2023, 4(1): 011303.

[2] Xue G, Zhou Z, Guo Q, et al. WS2 ribbon arrays with defined chirality and coherent polarity [J]. Science, 2024, 384(6700): 1100–1104.

[3] Novoselov K S, Mishchenko A, Carvalho A, et al. 2D materials and van der Waals heterostructures [J]. Science, 2016,

专题代号: A

插层 NbSe₂ 的高压物性研究

李璇1, 吴海玲1, 赵凌霄2, 刘影2, 1*, 朱金龙1, 2, 3*

 物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心, 南方科技大学,深圳 518055

2) 粤港澳大湾区(广东)量子科学中心, 深圳 518045

3) 新材料重大科学设施研院,南方科技大学,深圳 518055

Email: zhujl@ sustech.edu.cn

摘要:

物质在高压下被压缩,可以有效地缩短原子间的距离、增加相邻电子的轨道重叠、改变其自旋排布, 进而改变物质的晶体结构、电子结构和原子分子间相互作用,使之达到高压下平衡态,这时其物理、化 学性质会发生改变,并且可能变为新的结构^[1]。插层指的是将外来物质(如原子、离子或分子)插入材 料层间。插层不仅带来层间和客体间的协同效应,还引发层间相互作用的变化,诱导电荷(电子或电子 空穴)转移,从而导致面内成键构型、费米能级、电子带结构和自旋轨道效应的变化^[2]。二硒化铌 (NbSe₂)作为具有电荷密度波(CDW)与超导共存特性的典型层状材料,其块体与单层形态在物 性上呈现显著差异: 块体 NbSe₂ 超导临界温度($T_c \approx 7.2 \text{ K}$)较高但没有伊辛超导特性,而单层 NbSe₂ 虽展现伊辛型超导($\mu_0H_{c2/l}$ 超越泡利极限)却伴随 T_c 的大幅降低(\sim 3 K)^[3]。

为协同优化 NbSe₂ 的超导性能,本研究拟发展高压与插层协同调控新方法,利用原位高压光谱表 征技术,研究插层后的少层 NbSe₂ 在高压下的晶体结构、光学性能的变化规律,并与单层、2 层、块 体 NbSe₂ 拉曼光谱作对比。研究发现,插层后的 NbSe₂ 光谱中出现了未插层 NbSe₂ 光谱中没有的 E_{1g},表明插层改变了材料电子-声子耦合强度,增强 E_{1g} 的拉曼活性。插层物质的存在导致层间距增 大,削弱层间范德华相互作用,插层完成后的样品没有 E_{2g}¹,在加压到~3 GPa 时,压力使得层间距 离减小,层间相互作用力增大,从而使得 E_{2g}¹ 出现。两峰重合的压力点为~23 GPa,大于 13 L 样品 的重合压力点。插层显著改变了 NbSe₂ 的声子行为,赋予材料高压下更强的结构刚性,拓展了其在高 压器件中的应用潜力。

关键词: NbSe₂, 高压, 插层

参考文献

- 1. 张雪婷. 高压下过渡金属硫族化合物的性质和结构研究 [D], 2022.
- YANG R, FAN Y, MEI L, et al. Synthesis of atomically thin sheets by the intercalation-based exfoliation of layered materials [J]. Nature Synthesis, 2023, 2(2): 101-18.
- ZHANG H, ROUSULI A, ZHANG K, et al. Tailored Ising superconductivity in intercalated bulk NbSe2 [J]. Nature Physics, 2022, 18(12): 1425-30.

101

压力诱导分子-离子晶体转变驱动层状 Sbl₃光电特性增强

李宗伦 1.2、李全军 3*、康乐 1.2、刘冰冰 3

1中国科学院高能物理研究所 2散裂中子源科学中心 3吉林大学高压与超硬全国重点实验室 Email: liquanjun@jlu.edu.cn

摘要:

参考文献

探索并揭示层状材料中晶体和电子结构与其光电相关性质之间内在物理规律,对于促进高效光电能量转换至关重要。在本文中,我们利用压力工程策略,以层状金属碘化物 SbI₃和层状非金属碘化物 AsI₃为例,深入研究了层状碘化物的光电性质与其晶体/电子结构之间的关系。具体地,随着压力的增加,SbI₃的光电流响应显著增强,在4.4 GPa 时达到最大值 100 mA/W,几乎是初始压力下(8 mA/W)的十倍,同时保持超低的暗电流。SbI₃光电响应的显著增强与分子到离子的等结构相变密切相关,这种相变伴随着配位数的增加和电荷离域化。相反,随着压力的进一步增加,晶 SbI₃发生 *R*-3 到 *P*2₁/*c* 的一阶晶体结构相变,并配位数减少,导致其光电活性明显减弱。这些发现表明,强离子晶体特性、高配位数和高电荷离域化程度将会极大地促进层状金属卤化物的光电性质的提升,并有望扩展到其他层状功能材料光电性质调控。



图 1 压力诱导分子-离子晶体转变驱动层状 SbI₃光电特性增强 关键词:高压、层状金属卤化物、光学性质、分子晶体

- 1. Z. Li, S. Chen, F. Tian, S. Fang, Q. Li, M. Du, B. Yuan, L. Kang, L. Zhang, B. Liu, Acta Mater. 2024, 278, 120263.
- 2. Z. Li, D. Gao, S. Chen, L. Yue, B. Yuan, X. Shen, L. Kang, Q. Li, B. Liu, J. Mater. Chem. A. 2025, 13, 9801-9810.

专题代号:A

高压下 InSe 的光电性能

<u>林月</u>

吉林大学物理学院 lin yue2020@163.com

摘要:(摘要正文,中文,宋体五号字,其中英文和数字为 Times New Roman 五号字)

近年来,高压科学是研究各种物质在非常大的压力下的结构,性质变化的一门自然科学。随 着高压 技术的不断完善,材料在高压下的性能也在不断被研究。光电探测器作为一种可 以将光亦或是某种电 磁辐射转换成电信号的设备从而吸引了很多研究者的注意力。光电 探测器的应用也是十分广泛包括红 外成像,生物传感,通信领域等等,这些应用极大地 促进了人们的生产生活的飞速发展。高压作为一 种有效的实验手段可以在一定程度上拓 展光谱范围,这大大增强了红外成像的应用。同时高压可以调 控载流子的输运,复合以 即离子迟滞效应从而影响光电转换效率。自高压光电测试系统问世来,研究 人员陆续开 始对其进行研究。多项研究的陆续发展开拓了人们对高压光电领域的认知,同时也进一步 加速了我国新能源领域的飞速发展。

压电性能研究者们进行了广泛的研究将其设计成压力传感器,LED 灯,红外(紫外)自驱动光电探测器等。这些应用极大的方便了人们生产生活。下面是在应用方面的一些工作,我们或许基于此进行应用方面的进一步探索。这些基于金颗粒修饰的高性能应力门控晶体管和紫外光-应力双门控晶体管可用于柔性电子产品、光学微纳机电系统和可调的生物光电子探测器等。⁽¹⁾量学者们利用压电-光电效应制备出了多种器件,如各种波段的光电探测器、场效应管、发光二极管(LED)及压力传感器等。⁽²⁴⁾参考文献

- Pan C, Dong L, Zhu G, et al. High-resolution electroluminescent imaging of pressure distribution using a piezoelectric nanowire LED array [J]. Nature Photonics, 2013, 7(9):752-758.
- Zhao, Yaxue, et al. "Local irradiation effects of one-dimensional ZnO based self-powered asymmetric Schottky barrier UV photodetector." *Materials Chemistry and Physics* 166 (2015): 116-121.
- Zhang Y,Yang Y,Wang Z L.Piezo-phototronics effect on nano/microwire solar cells. Energy Environ.Sci,2012,5:6850-6856.
- Wen X,Wu W,Wang Z L.Effective piezo-phototronic enhancement of solar cell performance by tuning material properties.Nano Energy,2013,2:1093-1100.

镧系元素钬压力下的振动特性研究

刘沛源、杨留响*

北京高压科学研究中心 Email: peiyuan.liu@hpstar.ac.cn

摘要:

本文通过高压原位低波数共聚焦拉曼光谱测量系统,研究了镧系元素钬(Holmium)的六方相的拉 曼振动随压力的演化。研究发现,钬(Holmium)的拉曼振动模在高压下发生了一系列的变化,可以明 确确定高压下的相变行为。首先,镧系元素钬(Holmium)的声子频率在 0-7GPa 压力范围内,随压力 增加往高频移动。在压力大于 7GPa 时,又表现表现出明显的软化行为,但在此压力范围,钬没有明显 的晶体结构变化,据此推测这可能是由于电子结构相变引起的。在 Sm 型相结构中,钬的拉曼光谱峰发 生了明显的劈裂,并且可以拟合为两个峰。钬的高压原位拉曼振动模式的演化意味着,在压力环境下, 钬的晶体结构在高压下具有着很强的热力学不稳定性,在高压下会表现出复杂的相变行为。此外,我们 基于钬在不同压力下的结构特征和可能的电子相变,分段计算了其格林艾森常数(Grüneisen parameter)。 与其它元素相比,镧系元素的格林艾森常数随压力增加而变为负值,表明其在高压条件下具有负热膨胀 特性。本研究为深入理解镧系元素在高压下的结构与动力学行为提供了重要的实验数据。

关键词: 高压拉曼光谱; 镧系元素; 钬; 格林艾森常数 参考文献

- 1. CUNNINGHAM NC, QIU W, VOHRA YK. Observation of complete regular trivalent rare earth sequence in heavy lanthanide metal holmium under high pressure[J]. High Pressure Research, 2006(26): 43-50.
- PERREAULT CS, VOHRA YK. Static compression of rare earth metal holmium to 282 GPa[J]. High Pressure Research, 2020(40): 392-401.
- 3. OLIJNYK H. High pressure Raman spectra of Gd, Lu and Y [J]. High Pressure Research, 1994, 13(1): 99–102.
- 4. OLIJNYK H, NAKANO S, TAKEMURA K. Vibrational and elastic properties of hcp barium under pressure and their relation to its electronic structure [J]. Solid State Communications, 2007, 142(1/2): 41–44.

The Negative Change of the Spin Transition Temperature and Increase of the Hysteresis Width under Pressure

马楠

State Key Laboratory of High Pressure and Superhard Materials, Jilin University, Changchun Email: <u>manan22@mails.jlu.edu.cn</u>

In recent years, spin-crossover (SCO) compounds have emerged as a research hotspot in the field of intelligent molecular materials due to their multidimensional physicochemical cooperative responses during phase transitions. Among them, functional systems capable of achieving reversible magnetic and electronic switching under ambient conditions have attracted particular attention. This study investigates the SCO Fe(4F₃-pptr) constructed with a novel tridentate organic ligand, systematically revealing the modulation mechanisms of hydrostatic pressure on its spin-state transition temperature ($T_{1/2}$), thermal hysteresis width (ΔT), and optical properties. Experimental results demonstrate unique pressure-responsive characteristics of this compound: $T_{1/2}$ exhibits a significant negative correlation with applied pressure, accompanied by non-monotonic variations in UV-vis absorption spectra. Crystal field theory analysis reveals that these anomalous dual-pressure effects originate from pressure-induced trigonal distortion in the FeN₆ coordination octahedron. This structural distortion reduces the splitting energy (Δ_{oct}) between e_g and t_{2g} levels, thereby weakening the effective ligand field strength and stabilizing the high-spin state. This work not only elucidates a novel mechanism of spin-state regulation through coordination space symmetry breaking, but also provides new material design strategies for developing pressure-responsive smart devices with negative temperature coefficient characteristics.



Fig. 1. (a) Temperature dependence of the molar magnetic susceptibility; (b) Pressure-temperature phase diagram (the inset shows the ΔT vs. *P*); (c) High-pressure UV-Vis absorption spectra at room temperature. Keywords: high pressure, spin crossover, elastic interaction, temperature and pressure induced phase transition

Structural and Magnetic Properties of Multiferroic Composite

Mu Yinnang¹, N.A. Liedienov^{1,2}, I.V. Fesych³, A.V. Pashchenko^{1,2}

¹State Key Laboratory of High Pressure and Superhard Materials, Jilin University, 130012 Changchun, China ²Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine

³Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01033 Kyiv, Ukraine Email: mouyn23@mails.jlu.edu.cn; liedienov@jlu.edu.cn; fi150986@ukr.net; alpash@ukr.net

For the last decades, multiferroic materials have emerged as functional materials that exhibit simultaneously ferroelectricity, ferromagnetism, and/or ferroelasticity [1]. These materials hold significant potential for applications in information storage, magnetoelectric devices, and spintronic equipment. Research on perovskite-type multiferroic materials primarily focuses on simple perovskite structures, represented as *ABO*₃. This study aims to explore the mixture of LuFeO₃ (LFO) and Mn_{0.7}Zn_{0.2}Fe_{2.05}Ni_{0.05}O₄ (MZFNO) nanopowders to develop composite N₀ material with improved magnetoelectric coupling properties. The hysteresis loops indicate that the Curie temperature of the N₀ sample, obtained after pressing P = 0.2 GPa, is higher than that of the ferroelectric LuFeO₃ material. Additionally, both the residual magnetization and saturation magnetization have increased significantly. This suggests that the magnetism of the new multiferroic N₀ material, obtained under high pressure, has been enhanced.



 $Fig. \ 1. \ The \ hysteres is \ loops \ of \ the \ LuFeO_3 \ and \ Mn_{0.7}Zn_{0.2}Fe_{2.05}Ni_{0.05}O_4 \ nanopowders, \ as \ well \ as \ composite \ N_0.$

The inset displays the zero-field-cooled (ZFC) and field-cooled (FC) curves at H = 50 Oe.

Keywords: multiferroics, nanocomposites, ferrospinel, high-pressure studies, magnetic properties References:

 Zhang, G., et al., Enhanced Ferroelectric and Visible-Light Photoelectric Properties in Multiferroic KBiFe₂O₅ via Pressure-Induced Phase Transition. Advanced Electronic Materials, 2017. 3(3).

专题代号:A

层状磷硫族化合物在高压下的物性研究

乔倩 李威威 张孝亮 王贵 宋猛 张衡中*

北京高压科学研究中心,上海,201203 Email: gian.giao@hpstar.ac.cn

摘要:

自 2004 年 Novoselov 和 Geim 等人成功剥离出了石墨烯后,以其为代表的二维材料的研究进入了 快速发展时期。二维层状磷硫族化合物的通式可写成 MPXx,其中 M 为过渡金属(Cr、Mn、Fe、Co、 Ni、Zn 和 Cd)或 p 区金属(Ga、Sn、Bi),X 通常指 S 或 Se。由于 MPXx 化合物优异的电学、铁 电、光学磁性和催化等性能而在电池、场效应晶体管、光电探测器、催化等领域具有广泛的应用前景。 目前,人们利用温度、压力、维度、插层、异质结构、掺杂、电门控等多种变量/方法来调控二维材料 的固有性质和拓展其应用。其中,施加外压而无需改变材料的化学组成即可改变原子间距并改变其的电 子轨道,进而有效地调控材料的晶体结构和电子结构。

本工作中,我们通过高温固相反应法合成了 CdPSe₃和 GaPS₄等层状化合物。将金刚石对顶砧与同 步辐射 X 光衍射、拉曼光谱及紫外-可见吸收光谱等技术相结合,系统探究了其在 0-30GPa 压力范围 内的结构演化和带隙变化。目前的结果表明,CdPSe₃及 GaPS₄的拉曼峰随着压力增加而逐渐蓝移并最 终消失,而其带隙随压力增加持续减小。两种化合物的拉曼信号消失压力点与与其带隙突变压力点高度 相关,这表明它们可能发生了金属化。进一步的工作将深入探索磷硫族化合物在高压下的结构-性能关 系和物理机制。



图 1 CdPSe3 的在 0-30 GPa 压力下的拉曼光谱图

关键词: 高压科学,磷硫族化合物,高压拉曼光谱,带隙工程参考文献

1. Novoselov KS, Geim AK, Morozov SV, Jiang D, Zhang Y, Dubonos SV, Grigorieva IV, Firsov AA. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science. 2004 Oct 22;306(5696):666-9. doi: 10.1126/science.1102896. PMID: 15499015.

High pressure and high temperature modulation of electrical conductivity in high hardness silicon nitride-carbon composites

乔乔、马帅领、连敏、崔田

宁波大学物理科学与技术学院 Email: 1730410913@qq.com

摘要:

近年来,具有高硬度和导电性能的导电氮化硅陶瓷是很有前景的先进陶瓷材料。然而,在保证高硬度的同时提高其电导率是一个巨大的挑战。在这项工作中,通过高压高温(HPHT)下的金刚石相变方法合成了不同碳含量的氮化硅-碳复合材料。氮化硅中的α→β相转变使得α/β相共存,硬度可达23.15 ± 0.08 GPa,与致密氮化硅陶瓷相当,远高于合成的氮化硅-石墨复合材料。氮化硅基体中均匀分布的 金刚石在高温下石墨化形成导电通道,电阻降低至2×10-4 Ω·m,比纯氮化硅低十几个数量级。这种 相变烧结机制为设计高硬度的导电 Si₃N₄ 基陶瓷提供了一种方法。



图1实验图形摘要

关键词:氮化硅、金刚石、复合材料、硬度、电阻率参考文献:

1. F.L. Riley*, Silicon Nitride and Related Materials, J. Am. Ceram. Soc. 83 (2) (2000) 245-265.

2. Y. Zhang, H.J. Wang, W. Zhang, Z.H. Jin, Preparation and study of porous Si3N4 ceramics with high strength by gelcasting, Rare Met. Mater. Eng. 33 (6) (2004) 655–658.

3.Y. Zhou, H. Hyuga, D. Kusano, Y. Yoshizawa, K. Hirao, A tough silicon nitride ceramic with high thermal conductivity, Adv. Mater. 23 (39) (2011) 4563.

掺入 B₄C 的高熵 (Ti_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C 陶瓷韧性的增强

厍雲峰、连敏、马帅领*、崔田*

宁波大学物理与科学技术学院 Email: patience150@163.com

摘要:

近年来,高熵碳化物陶瓷 (HEC) (Ti_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C 因其优异的机械性能和高温稳定性而受 到广泛关注。然而,其相对较低的韧性限制了其广泛应用。本研究采用高压高温 (HPHT) 法制备了 不同 B₄C 摩尔比的 B₄C/(Ti_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C HEC (P = 5 GPa, T = 2000℃)。结果表明,随着 B₄C 含量的增加,高密度 (ρ > 8.0 g/cm3) 复合高熵碳化物陶瓷 (HEC+B₄C 复合材料)的韧性先增加后降低, 达到最大韧性值 (Ti_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C,约为原始韧性的两倍 (K₁c=11.4 MPa・m^{1/2}, H_v=22.15 GPa)。 HEC + B₄C 复合材料中 B₄C 与 (Ti_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C 之间的化学键强度不同,导致复合材料内部 形成力学性能的异质分布。这种非均质性促进了显著的裂纹偏转、裂纹分支和桥接。这有效地分散了裂 纹尖端的应力,消耗了断裂能量,从而提高了样品的韧性。这项研究为在 HEC 陶瓷中实现硬度和韧性 之间平衡的策略提供了宝贵的见解。

关键词: 高熵陶瓷 (HEC); B4C; 硬度和韧性; 高温高压。

参考文献

- H. Xiang, Y. Xing, F. Dai, High-entropy ceramics: Present status, challenges, and a look forward, J Adv Ceram 10 (2021) 385–441.
- L. Feng, W. Chen, W. G. Fahrenholtz, Strength of single-phase high-entropy carbide ceramics up to 2300°C, J. Am. Ceram. Soc. 104 (2021) 419–427.
- J. Zhao, Z. Fang, X. Jin, B₄C–TiB₂ composite with modified microstructure and enhanced properties from optimal size coupling of raw powders, J Am Ceram Soc. 106 (2023)

Tuning Wide Room Temperature Hysteresis in Novel Fe(II) Spin-Crossover Complexes

Danyang Su¹, N.A. Liedienov^{1,2}

¹State Key Laboratory of High Pressure and Superhard Materials, Jilin University, 130012 Changchun, China ²Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, NAS of Ukraine, 03028 Kyiv, Ukraine

Email: sudy22@mails.edu.jlu.cn; nikita.ledenev.ssp@gmail.com

Abstract:

In recent years, the miniaturization and integration of information technology have driven intensive research on molecular switches as the key to molecular-scale device regulation. Spin-crossover (SCO) complexes exhibit a hysteretic transition between high-spin (HS, S = 2) and low-spin (LS, S = 0) states under controllable external physical perturbations (temperature, pressure, light, magnetic field, etc.). The bistability aligns with "0-1" logic states, making them ideal candidates for molecular switches. One critical challenge is the mismatch between the hysteresis width (ΔT_h) of SCO complexes and the operational temperature ranges of electronic devices (typically 273–343 K, $\Delta T = 70$ K). ΔT_h should cover the core operating temperature range and even exceed ΔT to reduce the risk of accidental activation from device self-heating. However, most reported SCO complexes lack reproducible $\Delta T_{\rm h} \ge 70$ K, and barely exhibit complete overlap with the necessary temperature window. We designed a novel neutral Fe(II) SCO complex, [Fe^{II}(ppt-4Brph)₂]⁰, where ppt-4Brph is a new asymmetric ionogenic tridentate planar ligand 2-(5-(4-bromophenyl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)-6-(1H-pyrazol-1-yl) pyridine. Under ambient pressure, the cooperative complex exhibits a spin-transition hysteresis of 216–286 K ($\Delta T_{\rm h} \approx 70$ K), demonstrating a favorable hysteresis width. As pressure increases, the hysteresis width broadens, and the temperature window shifts toward room temperature: $\Delta T_{\rm h}$ achieves 92 K (212-304 K) at P = 0.04 GPa and expands to 144 K (188–332 K) at 0.09 GPa, exhibiting an unprecedentedly remarkable width. Additionally, high-pressure Raman and infrared spectra respectively reveal HS-LS driven pressures reaching 0.60-2.06 GPa and 1.15-2.73 GPa, corresponding to the phenomenon of magnetic hysteresis. The exceptional performance of this new SCO complex paves the way for transforming molecular switches from fundamental research to device applications, holding broad promise in smart materials. Keywords: Spin-crossover complexes, Bistability, High-pressure, Molecular switches

具有分子间电荷转移特性的 Pe-4F2CN 晶体的高压研究

孙驰原、陈姿润、刘慧宁、肖周坤、李爱森、李茜、王凯

聊城大学物理科学与信息工程学院

Email: kaiwang@lcu.edu.cn

摘要:

有机共晶属于一种结晶单相材料,由两种或多种不同的化合物以化学计量比组成,由非共价分子间 相互作用驱动,例如电荷转移相互作用、π-π堆叠、卤素键和氢键^[1-3]。共晶工程为实现具有可调发光特 性的功能分子的非共价合成提供了机会,由于多样化的化学物理特性,以及在有机发光二极管和有机场 效应晶体管等中的潜在应用^[4]。电荷转移共晶是较早报道的有机共晶之一。如果体系内存在富电子的电 子给体和缺电子的电子受体,给受体间就会发生电荷转移相互作用,并形成电荷转移共晶。在本研究中 选择花分子和四氟二氰基分子作为主客体分子,设计合成了一种有机共晶材料,并利用金刚石对顶砧压 机通过高压荧光和红外实验探究了它们的压力响应特性。同时,结合理论计算,进一步对其分子间电荷 转移作用以及变色机制进行了研究,为新型压致变色材料的开发提供了新的思路。

Pressure-Induced Enhanced Charge Transfer

图 1 压力诱导增强电荷转移

关键词: 高压, 有机共晶发光材料, 电荷转移 参考文献

- 1. D. Yan, D. G. Evans, Molecular crystalline materials with tunable luminescent properties: from polymorphs to multi-component solids, Mater. Horiz. 2014, 1, 46-57.
- S. Naskar, R. Moi, I. Das, K. Biradha, Halogen...Halogen and Halogen...π Interactions Enabled Reversible Photo-oligomerization of Conjugated Dienones: Visible Light Triggered Single-Crystal-to-Single-Crystal Transformation, Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61(23): e202204141
- Y. Xu, A. Hao, P. Xing, X...X Halogen Bond-Induced Supramolecular Helices, Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61(2): e202113786.
- 4. Y. Huang, Z. Wang, Z. Chen, Q. Zhang, Organic cocrystals: beyond electrical conductivities and field-effect transistors (FETs), Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58(29): 9696-9711.

专题代号:A

基于相变工程的三维阳离子卤化铅杂化材料中自陷激子发射增强

孙雪宁

聊城大学物理科学与信息工程学院 Email: sunxuening@lcu.edu.cn

摘要:

近年来,由有机配体和卤化铅无机网络通过配位键构成的三维阳离子卤化铅杂化物因其优异的环境 稳定性和宽带发射特性,已成为一种极具应用潜力的固态照明材料^[1-4]。然而,这类材料受无机网络良 好的连接性限制,晶格畸变受阻,荧光量子产率较低。我们通过压力诱导相变的方式,在三维杂化材料 [Pb2Br2][O2C(CH2)4CO2]中实现了 100 倍的自陷激子发射增强。值得注意的是,当压力完全释放后,荧 光峰相比于初始条件表现出 1.5 倍增强与 110 nm 的红移,有效改善了材料的光学性能。经过分析发现, 压力处理后荧光性能的优化与高压不可逆结构中 PbBr3O3 八面体畸变加剧以及晶格弛豫能增加有关。我 们的研究既改善了材料的光学性质,同时阐明了其内在的发光机制。为优化阳离子卤化铅杂化材料的宽 带发射性能,提升其在固态照明领域的潜在应用前景提供了新途径。



图 1 压力工程改善三维阳离子卤化铅杂化材料[Pb₂Br₂][O₂C(CH₂)₄CO₂]的光学性能 关键词:金刚石对顶砧,压力诱导结构相变,荧光增强

参考文献

- Sun, C.; Xi, R.; Fei, H., Organolead halide-based coordination polymers: intrinsic stability and photophysical applications. *Accounts Chem. Res.* 2023, *56*, 452-461.
- [2] Shi, Y.-J.; Yang, X.; He, H.-R.; Liao, W.-M.; Zhou, H. Q.; Chung, L. H.; Yu, L.; He, J., Water-stable halide coordination polymers with dual self-trapped exciton emissions for dual-mode Hg²⁺ sensing. *Inorg. Chem. Frontiers* 2023, 10, 4393-4401.

High-pressure stoichiometric evolution of the As-H system: Dimerization and decomposition

<u>王邵杰</u>、邬中炎、王霖

燕山大学理学院 Email: 15732170820@163.com

摘要:

The discoveries that the unconventional stoichiometric hydrides SH3 and P4H6 become superconductors with critical temperatures (Tc) of 203 and 103 K ^[1,2]at high pressures have motivated extensive investigations of hydrogen-rich compounds. The As-H system^[3–5], the hydride of the same main group, has also been predicted to have a variety of stoichiometric ratios with high Tc under high pressure. However, its high-pressure stoichiometry evolution and superconductivity remain unknown. Here, we explored the stoichiometric evolution and thermodynamic process of the As-H system under high pressure. We observed that AsH3 underwent liquefaction and solidification at approximately 0.01 and 1.7 GPa, respectively. Upon further compression, AsH3 dimerizes into As2H4 at 7.0 GPa. As2H4 is unstable, decomposing into gray arsenic at pressures above 20.0 GPa or amorphous arsenic upon decompression. This comprehensive exploration of the high-pressure stoichiometric evolution of As-H is crucial for exploring superconductivity in the As-H system and understanding the internal arsenic cyclin in planets like Jupiter and Saturn.



FIG. 1. Selected Raman spectra of the As-H system collected at room temperature upon compression in the spectral region of (a) $100-1200 \text{ cm}^{-1}$, (b) $2000-2300 \text{ cm}^{-1}$, and (c) $4100-4300 \text{ cm}^{-1}$, respectively.

关键词: As-H system、High pressure stoichiometric、Dimerize.

CrFeNiAl_x(x=0、0.1、0.3)高熵合金在高压下的相变研究

王宇双1)2)、张飞1)、蒋佳月1)2)、李晓东1)#

1) 中国科学院高能物理研究所多学科中心,北京100049

2) 中国科学院大学核科学与技术学院,北京101408

Email: yswang@ihep.ac.cn

摘要:

高熵合金以其独特的可调控多主元成分特性,打破了传统合金的单主元成分设计理念, 使其在极端条件下展现处应用潜景。因此,开展成分对高熵合金在高压下的相变研究,不仅有 助于理解并预测其在极端条件下的服役表现提供理论基础,也将进一步丰富凝聚态物理中多主 元体系的相变理论。本工作针对 FCC 结构 CrFeNiAl_x(x=0、0.1、0.3)这一合金体系,利用原位 高压同步辐射衍射技术,系统研究了高压下成分对该体系相结构稳定性的影响,发现了该体系 合金存在压力诱导 FCC-HCP 相变的现象(如图 1 所示)。基于原位高压 XRD 结果,分析探讨 了不同合金点阵结构、相体积分数随压力的演变情况,以及 AI 含量变化对合金体模量、相变 过程以及相结构稳定性的影响规律。结果表明,成分对该体系样品相结构稳定性及变形机制具 有重要调控作用,为极端条件下的力学性能研究提供了新的实验和理论依据。



图 1 高熵合金 CrFeNiAl_x(x=0、0.1、0.3) 在不同压力下的衍射谱

关键字: 高熵合金、高压、相变、同步辐射

专题代号:A

高温高压烧结 TaSi2 的微观结构和物理性能研究

<u>王志坤</u>、于亚杰、陈海花

青海大学机械工程学院 Email: 15034346570@163.com

摘要:二硅化钽(TaSi2)因其高硬度、高温抗氧化性和低电阻率等优异的物理性能而受到 广泛研究。在这里,我们的目的是研究不同烧结温度和压力对TaSi2陶瓷微观结构和物理性 能的影响。我们使用高压高温(HPHT)烧结技术成功制备了致密的TaSi2陶瓷。表征结果表 明,TaSi2陶瓷的性能受到烧结温度的强烈影响。TaSi2烧结样品的密度、维氏硬度和断裂韧 性分别达到最大值9.182g/cm3、11.34GPa和11.97MPam1/2。TaSi2烧结样品的断裂韧性显 著提高,并且还表现出优异的高温抗氧化性。同时,我们还使用扫描电子显微镜(SEM)和 电子背散射衍射(EBSD)研究了TaSi2烧结样品的微观结构和晶粒尺寸随烧结条件的变化。 结果表明,高温高压烧结可以有效细化TaSi2陶瓷的晶粒。它为更有效地利用TaSi2和制备 其他高性能陶瓷提供了有效的数据和思路。



图1 (a)烧结装置示意图。(b)烧结实验中压力和温度的设定。(c)TaSi2烧结样品。(d)用于高温高压烧结实验的压机设备和控制台。

关键词: 陶瓷;断裂韧性;显微组织;维氏硬度;抗氧化性能参考文献

1. Cui CJ, Zhang J, Liu L, Fu HZ. Mechanical properties of the TaSi2 fibers by nanoindentation. J Mater Sci Technol 2010;26:65-8. http://dx.doi.org/10.1016/S1005-0302(10)60010-2.

2. Laborde O, Bossy J, Affronte M, Schober H, Gottlieb U. Some properties of the phonon spectra of transition metal disilicides VSi2, NbSi2, and TaSi2. Solid State Commun 2003; 126: 415–9.http://dx.doi.org/ 10.1016/ s0038-1098 (03)00085-1.

高压下二维金属卤素钙钛矿的激子工程:深蓝光发射增强与光电流 响应调制

魏林;尤照江;孟新淼;房媛媛;李爱森;李守瑞;王凯;李茜

聊城大学 物理科学与信息工程学院

Email: www18369460337@163.com

摘要:

近年来,二维金属卤素钙钛矿因其优越的光电性能而受到广泛关注,它在太阳能电池、发光二 极管、光电探测器、激光器等领域有着广泛的应用,然而在二维金属卤素钙钛矿中精确设计激 子以实现目标光致发光性质仍然是一个巨大的挑战。在这项工作中,高压被用于精确调控 10 % Pb²⁺掺 杂的二维钙钛矿 BDACdBr4(BDA: 1,4-丁二胺)中自由载流子、自由激子和自陷激子之间的转换与平衡。 高压下,相互作用较弱的层间结构被显著收缩,电-声耦合作用降低且激子结合能减小,限制激子的系 间窜跃,更多光生激子以自由激子形式返回基态。材料自陷态激子发光逐渐减弱,且自由激子发光逐渐 增强。随着压力继续升高,常压结构转为高压相,激子结合能的进一步降低使得激子一方面以自由激子 形式辐射跃迁,引起强烈深蓝光发射。同时,光生激子还会发生解离,促进自由电荷迁移引起光电流效 应的增强。



图 1. 高压调控 10 % Pb2+掺杂的 BDACdBr4 激子捕获和解离以及高压下产生的强烈深蓝光发射

关键词:金属卤化物钙钛矿,光电流,自陷态激子,金刚石对顶砧

专题代号:A

高压下非铅双钙钛矿 Cs2TeCl6 的光电性质调控研究题目

吴姝颖 马帅领*赵春燕 李世新 叶梅艳 戚梦瑶 赵行斌 崔田*

宁波大学大学物理科学与技术学院暨高压物理研究院 Email: 2411690126@nbu.edu.cn (Times New Roman 五号字)

摘要:

光电探测器在光通信、环境监测、医疗成像等多个领域发挥着关键作用,开发高性能的光电探测器 相关材料已经成为研究热点。A2BX6型空位有序双钙钛矿因其优异的光电特性备受关注,然而其光电 性能的调控手段依然十分困难。本文研究了Cs2TeCl6在高压下原位光电响应变化。实验结果显示,随 着压力的增加,Cs2TeCl6光电信号先减弱至消失,在18GPa后光电流再次出现并持续升高。结合高压 原位拉曼光谱、高压紫外-可见吸收光谱,发现18GPa时光电出现再次增强是由于Cs2TeCl6进入强化 压缩阶段,使得带隙减小速率增加,带隙的持续减小改善了间接带隙的弱吸收,导致无法激发的低能光 子被有效吸收,光电流减小趋势逆转为增强趋势。本研究成果不仅清晰地揭示了Cs2TeCl6的微观结构 与其宏观光电性能之间的内在关联,更为今后进一步提高此类钙钛矿材料的光电性能开辟了全新的思路 与途径。



图 1 Cs2TeCl6在环境条件下的样品表征(a) Fm-3m 相 Cs2TeCl6的晶体结构 Cs2TeCl6的 X 射线衍射

(XRD); (b) Fm-3m 相 Cs₂TeCl₆的晶体结构; (c) Cs₂TeCl₆的拉曼光谱; (d) Cs₂TeCl₆的吸收光谱 关键词: 非铅双钙钛矿, Cs₂TeCl₆, 高压, 光电探测 参考文献

1. Li Y, Shi Z F, Li X J, Shan C X 2019 28 017803

基于非常规发光有机小分子材料的发射增强

武敏

聊城大学物理科学与信息工程学院 Email: wumin@lcu.edu.cn

摘要:

近年来,不含大共轭结构的非常规有机发光材料因具有优异的水溶性、良好的生物相容性和环境友 好等优点,引起了科研人员的广泛关注^[1-3]。然而,与传统的有机发光材料相比,有限的共轭域使得这 类材料的发光效率普遍偏低。我们引入高压调节结构手段,在多种含 N、O 杂原子的非常规发光有机小 分子中,实现了高达 100 倍左右的光致发光增强和显著的发光颜色调节。压力完全释放后,其改善的发 光性能仍能保留。经过分析发现,优化的发光性能源于高压诱导结构不可逆变化,使得分子振动受限和 潜在发光官能团聚集。通过系统研究这类材料聚集结构与光物理性质之间关系,明确提升其光学性能的 途径,以期为高发光材料的开发和设计提供新策略。

关键词: 金刚石对顶砧, 高压, 发光增强

参考文献

- Li Q., Wang X., Huang Q., et al. Molecular-level enhanced clusterization-triggered emission of nonconventional luminophores in dilute aqueous solution. *Nat. Commun.* 2023, 14, 409.
- [2] Sun H., Li X., Hsu C., et al. Sulfur lone pairs open avenues for $\pi^* \rightarrow n$ orange-to-red TADF and OLEDs. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, 147, 6, 5432–5439.
- [3] Ji X., Tian W., Jin K. et al. Anionic polymerization of nonaromatic maleimide to achieve full-color nonconventional luminescence. *Nat. Commun.* 2022, 13, 3717.

压痕下单晶硅具有取向依赖性的相变

杨虹宇、翟春光、姚明光*

吉林大学物理学院高压与超硬材料国家重点实验室 Email: yaomg@jlu.edu.cn

摘要:

作为微米/纳米机电系统和集成电路(IC)的核心材料,单晶硅在微纳尺度下的相变特性直接决定 器件性能^[1]。研究单晶硅在非静水压力下的响应行为,不仅是基础科学的重要课题,更是优化硅基器件 制造工艺的迫切需求。通过利用压痕原位拉曼光谱实验^[2,3]发现单晶硅呈现显著各向异性相变:五配位 BCT-5和六配位 Si-II 相出现在压头一侧,而扭曲四配位 dc 相则更易出现在另一侧。并结合大规模分子 动力学模拟,发现单晶硅在{111}<110>滑移系统更容易发生从 Si-I 到 BCT-5和 Si-II 的相变。我们的结 果表明{111}<110>滑移系统的应力集中效应是诱导相变选择的关键机制,阐明了 Si-I 向 BCT-5/Si-II 相 优先转变的路径。

关键词:纳米压痕,原位拉曼光谱,单晶硅,非静水压,相变

参考文献

1. Jiapeng, S., Cheng, L., Han, J., Ma, A. & Fang, L. Nanoindentation induced deformation and pop-in events in a silicon crystal: molecular dynamics simulation and experiment. *Scientific reports* **7**, 10282 (2017).

2. Gerbig, Y. B., Michaels, C. A., Forster, A. M. & Cook, R. F. In situ observation of the indentation-induced phase transformation of silicon thin films. *Physical Review B* **85**, 104102 (2012).

3. Maslenikov, I., Reshetov, V., Useinov, A. & Doronin, M. In situ surface imaging through a transparent diamond tip. *Instruments and Experimental Techniques* **61**, 719-724 (2018).

(Ti_{0.2}Zr_{0.2}Nb_{0.2}Hf_{0.2}Ta_{0.2})C的高温高压合成及其物性研究

杨烁、陈旺、马帅领*、崔田*

宁波大学高压物理科学研究院, 宁波 315211 Email: mashuailing@nbu.edu.cn

摘要:

过渡金属碳化物高熵陶瓷,是由五种或更多等摩尔或近等摩尔比的元素组成。更高的混 合熵导致更均匀的晶体结构,具有更好的力学性能、抗氧化性、低导热性以及出色的耐高温 性。研究表明,这类高熵材料因其独特的四大核心效应:高熵效应、晶格畸变效应、迟滞扩 散效应和"鸡尾酒"效应,展现出优异的力学性能。这些卓越的性能使高熵碳化物陶瓷成为硬 质材料和超高温结构材料的有力候选者^[1-3]。作为决定陶瓷力学性能的关键因素,晶界特性、 晶粒尺寸、缺陷分布和致密度之间存在复杂的相互作用机制。然而,烧结过程中显著的晶粒 生长会急剧降低界面密度,导致力学性能的劣化。因此探究一种新的工艺,来制备高致密细 晶 HEC 陶瓷材料是至关重要的。

本工作采用高温高压烧结技术,在5 GPa 与 15 GP,800-2200 ℃,保温 15 min 的条件下,以纳米级粉末(~100 nm)为前驱体,制备了高硬度和高断裂韧性的高致密细晶 HEC 陶瓷。并且对 HEC 陶瓷的微观结构和力学性能进行了表征,以研究致密化过程和力学性能的强化机制。



图 1 (a) 在 5 GPa 和不同温度下烧结样品的 X 射线衍射图谱; (b) HEC 的晶体结构图; (c) 在 不同温度和压力下烧结的样品的相对密度; (d) 15 GPa 压力下不同温度 HEC 试样的硬度和 压痕断裂韧性

关键词: 高温高压、高熵陶瓷、维氏硬度、断裂韧性 参考文献:

[1] Xiang H M, Dai F Z, et al. High-entropy ceramics: Present status, challenges, and a look forward. Journal of Advanced Ceramics, 2021, 10: 385-441.

[2] Luo S C, Guo W M, et al. Fine-grained dual-phase high-entropy ceramics derived from boro/carbothermal reduction. *Journal of the European Ceramic Society*, 2021, 41: 3189-3195.

[3] Sarker P, Harrington T, et al. High-entropy high-hardness metal carbides discovered by entropy descriptors. *Nature Communications*, 2018, 9: 4980.

专题代号:A

插层与高压协同策略实现 Mo₂S₃超导电性

于林超、李全军、刘冰冰

吉林大学大学 高压与超硬材料全国重点实验室 Email: yulinchao1998@163.com

摘要:

类石墨烯材料的兴起引发了对过渡金属二硫属化物(TMDs)的研究热潮。作为一类典型的层状材料,TMDs 展现出丰富的电子行为特性,包括绝缘态、电荷密度波态、金属态,甚至是超导态。二硫化钼(Molybdenum Disulfide, MoS₂)作为 TMDs 的代表性材料,因其 1.29 eV 的间接带隙特性而成为研究 焦点。通过碱金属/碱土金属插层改性,MoS₂可实现金属化转变并诱导超导转变,实验测得最高临界转 变温度(*T*_c)可达 6 K。然而,此类化学掺杂策略面临显著挑战:一方面金属插层会显著降低材料的结 构稳定性,另一方面过量插层容易导致材料分解。除化学掺杂外,高压为诱导材料绝缘体-金属相变提 供了新途径。在高压条件下,MoS₂会经历由层间滑移驱动的结构相变,从 2*H*_c型转变为 2*H*_a型。第一 性原理计算结果表明,即使在高达 100 GPa 的极端压缩条件下,其超导转变仍难以实现。最新的高压实 验研究证实,仅当压力达到约 90 GPa 时,材料显现出 *T*_c≈3 K 的超导特征。如何通过创新性技术手段 在维持材料结构稳定的前提下,实现 MoS₂在更低压力条件下的超导调控,仍然是该领域亟待突破的关 键科学问题。



图 1 Mo₂S₃样品合成与高压下电学测试

关键词:过渡金属二硫属化物、插层、高压、超导

参考文献(中文小五号宋体,其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- 1. Zhao, C.; Fang, Y.; Chen, H.; Zhang, S.; Wan, Y.; Riaz, M. S.; Zhang, Z.; Dong, W.; Diao, L.; Ren, D. Ultrathin Mo₂S₃ nanowire network for high-sensitivity breathable piezoresistive electronic skins. *ACS Nano.* 2023, 17, 4862–4870.
- Chi, Z.-H.; Zhao, X.-M.; Zhang, H.; Goncharov, A. F.; Lobanov, S. S.; Kagayama, T.; Sakata, M.; Chen, X.-J. *Phys. Rev. Lett.* 2014, 113(3), 036802.
- Chi, Z.; Chen, X.; Yen, F.; Peng, F.; Zhou, Y.; Zhu, J.; Zhang, Y.; Liu, X.; Lin, C.; Chu, S.; Li, Y.; Zhao, J.; Kagayama, T.; Ma, Y.; Yang, Z. Superconductivity in Pristine 2H a -MoS 2 at Ultrahigh Pressure. *Phys. Rev. Lett.* 2018, 120, 037002.

二硼化铬的高压合成、力学性能和磁性

<u>张浩、</u>马帅领、赵行斌、崔田

宁波大学高压物理科学研究院

摘要:

尽管在实现硼烯方面存在持续的合成挑战,但过渡金属二硼化物以蜂窝状硼烯亚结构和弱层间耦合为特征,作为潜在可行的替代品正在吸引越来越多的兴趣。在此,我们 采用高压高温法合成了具有蜂窝状硼亚结构的 CrB 2 块体样品。CrB 2 产生 12.3 GPa 的渐近硬度和 3.62 MPa•m1/2 的断裂韧性。第一性原理计算,证实了 X 射线光电子能 谱,揭示了高硬度源于强共价键和刚性硼网络,而增强的断裂韧性产生的机械各向异性 和层内的金属字符。铬原子通过填充空 π 带的电子转移来稳定蜂窝结构,该过程主要由 强定向 Cr-3d a1 g 轨道介导。此外,CrB 2 还表现出典型的反铁磁行为,其 Néel 温度 为 96 K。样品中缺陷结构的存在影响其磁性行为,导致随着温度的升高,从铁磁到反铁 磁,然后到顺磁行为的转变。这项工作为理解金属稳定蜂窝硼亚结构的机制提供了一个 有价值的平台,为未来的硼氢化物材料合成铺平了道路。





 K. Kotmool, T. Kaewmaraya, S. Chakraborty, J. Anversa, T. Bovornratanaraks, W. Luo, H. Gou, P. C. Piquini, T. W. Kang, H. K. Mao, R. Ahuja, Revealing an unusual transparent phase of superhard iron teraboride under high pressure, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 111 (2014), 17050-17053.

[2] G. Akopov, M.T. Yeung, R.B. Kaner, Rediscovering the crystal chemistry of borides, *Adv. Mater.* 29 (2017) 1604506.

[3] Z. Xiang, Y. Zhang, Q. Lu, Q. Li, Y. Li, T. Huang, Y. Zhu, Y. Ye, J. Sun, H. Wen, Superconductivity up to 14.2 K in MnB₄ under pressure, *Adv. Mater.* 37 (2024), 2416882.

[4] T. S. R. Ch Murthy, J. K. Sonber, K. Sairam, R. D. Bedse, J. K. Chakavartty, Development of refractory and rare earth metal borides & carbides for high temperature applications, *Mater. Today: Proc.* 3 (2016), 3104-3113.

高压下锰基金属卤化物(TMS)2MnBr4的结构及光电性质的研究

张海娃、张鹏、李海宁、张国召、蔡伟照、王凯、刘才龙

¹聊城大学物理科学与信息工程学院 ²电子科技大学材料与能源学院 Email: <u>cailong_liu@jlu.edu.cn; Z2012GZ@163.com</u>

摘要:

有机-无机杂化金属卤化物(OIMHs)因其优异的光电性能和结构可调性,在光电器件领域展现出 广阔的应用前景。其中,Mn²⁺基 OIMHs 凭借其低成本、环境友好性和独特的发光特性成为研究热点。 Mn²⁺的发光行为与其配位环境密切相关:在八面体配位(Mn-Br₄)中呈现红色发射,而在四面体配位 (Mn-Br₄)中则产生绿色发射。本研究以具有 Mn-Br 四面体结构的(TMS)₂MnBr₄为研究对象,通过高压 手段调控其配位结构及光学性质。研究结果表明,卸压过程中材料发生了从零维到一维的结构转变, Mn-Br 的配位环境由四面体转变为六面体,伴随荧光发射从绿光(~520nm)到黄光(~580nm)的可 逆转变。此外,在加压过程中,由于晶格应变效应,(TMS)₂MnBr₄表现出从单发射峰到双发射峰的转变 现象。本研究展示的压力调控策略可拓展至其他金属卤化物体系,在应力传感、信息加密和多功能发光 器件等领域具有重要应用价值。



关键词: 有机-无机杂化金属卤化物, 高压调控, 双发射, 零维到一维结构转变

图 1 卸压过程不同压力下的(TMS)₂MnBr₄的荧光光谱(插图为零维与一维结构共存状态)

范德华层状半导体 SnPSe₃中的压力诱导超导性

赵春燕、马帅领、戚梦瑶、崔田

宁波大学物理科学与技术学院学院 | 高压物理科学研究院 Email: 3122536719@qq.com

摘要:

作为范德华层状材料中极具潜力的成员,金属磷三硫族化合物(MPX₃)家族因其独特且丰富的物理性 质备受关注,为深入研究低维系统中的新奇量子态提供了绝佳平台。本文报道了 SnPSe₃中的压力诱导 超导性。结合电输运、同步辐射 X 射线衍射和拉曼光谱的高压研究一致表明,在临界压力 P_{c1}≈16.2 GPa 时,SnPSe₃会伴随金属化出现超导转变,这一现象源于结构相变。此外,当压力超过 P_{c2}≈31.9 GPa 后, SnPSe₃会演变为非晶态,此时超导性虽受到抑制,但仍能在高达 80.2 GPa 的压力下持续存在。这些发 现不仅丰富了范德华材料的研究范畴,也激励我们通过压力调控手段探索新型超导体。



图 1. (a)不同压力下电阻 - 温度曲线 (b) 16.2 GPa 时电阻 - 温度曲线局部放大 (c) 超导转变附近 电阻 - 温度曲线放大 (d) 40.1 GPa 下不同磁场中电阻 - 温度曲线 (e) 上临界场与超导临界温度关系 关键词: SnPSe₃、范德华层状材料、压力诱导、超导性 参考文献:

 S.Dai, Z. Rei,Q.Ma,A.S.Rodin,M.Wagner, A.S. McLeod, M.K.Liu,W.Gannett,W.Regan,K.Watanabe, T. Taniguchi, M. Thiemens, G.Dominguez, A.H. Castro Neto, A. Zettl, F. Keilmann, P. Jarillo-Herrero, M.M.Fogler and D.N.Basov, Science, 2014, 343,1125-1129.

2. J.M. Lu, O.Zheliuk, L.Leermaker, N.P.Q.Yuan, .Zeitler, K.T. Law and J.T.Ye, Science, 2015, 350, 1353-1357.

3. H.Kim,s.Z.Uddin,D-H. Lien,M.Yeh,N.S. Azar, S. Balendhran,T. Kim, N.Gupta,Y.Rho,C. P.Grigoropoulos, K. B. Crozier and A.Javey, Nature, 2021,596,232-237.

The Force-Electric Coupling Effect of Single-Walled Carbon Nanotubes under Extreme Conditions

Pengcheng Zhao^{1,2}, Yabin Chen^{1,2,*}

¹School of Aerospace Engineering ²School of Interdisciplinary Science, BIT Beijing Institute of Technology, Beijing 100081 *Email: chyb0422@bit.edu.cn

Abstract: Single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) have attracted much attention due to nanoscale size and excellent mechanical and electrical properties. Extreme conditions can significantly alter the atomic spacing of SWCNTs, causing structural collapse and endowing unique physical and chemical properties. However, the mechanical and electrical properties of SWCNTs with different chirality under high pressure are still unclear. Herein, we systematically studied the structural phase transitions and force-electric coupling effects of SWCNTs under high pressure using diamond anvil cell (DAC), combined with Raman spectroscopy, physical property measurement systems, and atomic force microscopy (AFM) technology. The Raman spectroscopy showed that the radial breathing mode (RBM) peak disappeared and the G peak broadened under extreme conditions, which confirm the structural phase transition. Compared with high pressure electrical transport measurements, a sudden change in resistance occurs under the same pressure. The structural collapse of different chirality SWCNTs under extreme conditions was further confirmed by van der Waals assembly and AFM technology. Further investigation of the collapsed SWCNTs showed that the excellent mechanical and electrical properties with significant chirality dependence. This discovery may provide insights into the performance regulation of nanomaterial and device design.



Figure 1. Illustration of *in situ* electrical measurements in DAC and phase transition process Key words: Single-walled carbon nanotubes; High pressure; Force-electric coupling effect; Chiral dependence

单晶 Si 的孪晶调控

赵松 仝柯

燕山大学高压科学研究中心 Email: zhaosong96@126.com

摘要:

兼具高强度/高韧性的工程材料是人们梦寐以求的,但材料的强度和韧性通常是倒置的,很难兼得。 这一点在陶瓷材料中表现尤为突出。纳米孪晶组织一方面有效地阻碍了位错运动从而实现材料的强化, 另一方面又可以阻碍裂纹扩展实现材料的韧化,为破解材料强韧性倒置关系提供了新途径。然而,共价 陶瓷中形变孪晶的调控机理尚不完备。本工作以典型的共价陶瓷 Si 为研究对象,利用高温压缩的方式, 探究了加载方向、形变方式和形变量等工艺参数对其形变孪晶组织的影响,成功制备了具有形变孪晶组 织的<100>、<110>和<111>取向单晶 Si,借助 TKD 和 TEM 技术半定量地统计了孪晶宽度、孪晶密度以 及孪晶分布等显微组织结构特征,结合分子动力学模拟从原子尺度上阐述了共价陶瓷中形变孪晶的调控 机理。结果表明:形变孪晶的产生与加载方向密切相关,<110>加载方向最容易产生形变孪晶,<100> 方向次之。对于<100>加载方向而言,孪晶形成的临界形变量约为10%。且随着变形量的增加,孪晶变 宽,孪晶密度增加,并伴随不同的孪晶变体产生。

关键词: 共价陶瓷; 组织调控; 单晶 Si; 形变孪晶

专题代号:A

$NaAlSi_20_a 在高温高压下的相变研究$

陈政洁、贺端威

四川大学原子与分子物理研究所 四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室 E-mail: <u>duanweihe@scu.edu.cn</u>

摘要:

翡翠色泽温润、质地坚韧,属于玉中的"硬玉"一类。天然硬玉是一种多晶矿物,主要成分是 NaAlSi₂O₆,目前人工合成翡翠的主流工艺大多采用高温高压法,该方法的关键是翡翠前驱体的合成以 及玻璃质非晶硬玉到硬玉的转化。在这个过程中,找到一种条件相对温和的翡翠前驱体合成方法成为了 人工合成翡翠的难点和突破点。

近期,我们通过国产铰链式六面顶压机探究在压力 0.001~5.0 GPa、温度 900~2000 ℃的条件下,天然翡翠发生相变得到低压相前驱体的温度变化趋势,寻找最适宜的相变温压条件,完善 NaAlSi₂O₆ 高压相图,对于人工合成高品质翡翠有重要的参考价值。

关键词: 硅酸铝钠; 高温高压; 相变

参考文献

- 1. Bell P M *et al.*, Melting relationships of jadeite and albite to 45 kilobars with comments on melting diagrams of binary systems at high pressures[J]. Mineralogical Society of America Special Paper, 1969, 2: 151-169.
- Robertson E C *et al.*, Experimental determination of jadeite stability relations to 25, 000 bars[J]. American Journal of Science, 1957, 255(2): 115-137
- 3. 胡艺,贺端威,胡启威,等.人工翡翠的高温高压合成及表征[J].高压物理学报,2015,29(4):241-247
- 4. 杜雁春,贺端威,胡艺,等.高压合成翡翠微结构的研究[J].高压物理学报,2016,30(6):441-447.
- 5. T. Irifune et al., Pressure-induced nano-crystallization of silicate garnets from glass Nature Communications, 7(2016) 13753

Pressure-induced structural transition of pyrochlore Tm₂Sn₂O₇

The geometrically frustrated pyrochlore Tm2Sn2O7 is an insulator with a slight trigonal lattice distortion at ambient conditions. High pressure was applied to this system to investigate the responses of structural evolution. In-situ angle-dispersive synchrotron X-ray diffraction and Raman spectroscopy analyses have been performed on Tm2Sn2O7 up to 52.6(1) GPa and 62.1(1) GPa, respectively. It was found that Tm2Sn2O7 transformed from the cubic (Fd3m) structure to the orthorhombic (Pnma) structure around 36.7(1) GPa. The phase transition was mainly induced by the increased cation disorder upon compression, which efficiently modified its surrounding coordination environment. After releasing pressure, both experimental results revealed that the structural phase transition was reversible

Structural stability and equations of states of lanthanum up to 337

GPa

¹Center for High Pressure Science, State Key Laboratory of Metastable Materials Science and Technology, Yanshan University, Qinhuangdao, Hebei 066004, China ²Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF), Shanghai 201800, China

The crystal structures, equations of state, and compressibility of lanthanum have been investigated up to 337 GPa using synchrotron X-ray diffraction. We observe the following phase transition sequence: dhcp $(hP4) \rightarrow \text{fcc} (cF4) \rightarrow \text{distorted fcc} (hR24) \rightarrow \text{distorted fcc} (oI16) \rightarrow \text{fcc} (cF4) \rightarrow I4/mmm (tI2)$, with complete transformation to the tI2 phase at 82.8 GPa. Remarkably, tI2-La remains stable up to 337 GPa, isostructural with the high-pressure phase of lanthanides Ce, Pr and actinide Th at the hitherto studied highest pressure. Analysis of the equation of state reveals that tI2-La demonstrates compressive behavior comparable to simple metals (Au, Cu), suggesting nearly ideal metallic characteristics at ultrahigh pressures.
碳化铬与立方氮化硼在高压下的弹性力学性质研究

房雷鸣, 何瑞琦, 孙嘉程

中国工程物理研究院核物理与化学研究所 Email: flmyaya2008@163.com

摘要:

过渡金属碳化物 Cr₃C₂具有高的熔点、优良的机械性能、耐磨性、抗辐射,被广泛应用于轴承、涂 层材料、燃料包壳材料等工业领域。cBN 作为应用仅次于金刚石的超硬材料,已广泛应用于切削、钻 孔等工业加工领域。针对 Cr₃C₂与 cBN 陶瓷材料,我们利用高压超声干涉技术详细开展了其弹性力学 性质研究。高压超声干涉技术是在高温高压极端条件下,通过测量高频弹性波在样品中的横波/纵波传 播时间及样品厚度来获得材料声速(V_{p. s}=21/t)的一种方法[1]。利用声速可以进一步得到材料的弹性 力学性质及部分与声学相关的热力学性质。我们对过渡金属碳化物 Cr₃C₂的烧结研究发现,Cr₃C₂在高 温高压过程中存在晶粒生长和细化的竞争行为,导致其在 15 GPa/1200 ℃ 和 15 GPa/1500 ℃ 条件下的密 度和力学性能发生异常变化[2]。利用高压超声干涉技术获得了 Cr₃C₂的声速-弹性数据,系统地研究了 其本征的体积模量、剪切模量及其压力依赖性行为,并认为其化学键中的高离子组分是导致其具有韧脆 性临界 Pugh 值和泊松比的原因[3]。利用高温高压技术合成了重结晶前后 3 种晶粒尺寸的 cBN 陶瓷材 料,并利用高压超声干涉技术详细研究了晶粒尺寸对 cBN 弹性力学性质的影响。另外对 cBN-AIN 复合 陶瓷材料开展了高压声速测量实验,详细究了 AIN 粘结剂相对 cBN-AIN 复合陶瓷的体积模量、剪切模 量、热导率、热膨胀系数等弹性力学及热力学参数的影响[4]。

关键词: 高压超声干涉技术; 高压声速; 弹性力学性质; 碳化铬; 立方氮化硼 参考文献

- 1. Q. Li, X. Chen, et al., Chin. Phys. B 2022, 31:060702
- 2. R. He, L. Fang, et al., J. Eur. Ceramic Soc. 2025, 45: 116822
- 3. R. He, L. Fang, et al., Scr. Mater. 2023, 224:115146
- 4. J. Sun, R. He, et al., *Ceram. Int.* 2024, 50:27080-27085

超轻质高强单相铝基复杂成分合金

曾桥石

北京高压科学研究中心(上海) Email: zengqs@hpstar.ac.cn

摘要:

开发轻质且高强度的铝基合金因节能结构材料的日益需求而受到广泛关注。然而,由于其他轻质元 素在铝中的溶解度有限,这一研究方向面临挑战。在本次报告中,我们提出通过施加高压和高温,将多 种脆性相转化为延展性固溶体,从而在铝基复杂浓缩合金(CCA)中实现这一目标。我们成功制备出 一种面心立方单相铝基 CCA(AlssMgssLisZns),其密度仅为 2.40 g/cm³,特定屈服强度高达 344×10³ N·m/kg,显著优于传统铝基合金(约 200×10³ N·m/kg)。分析表明,该单相 CCA 的形成归因于高压下 原子尺寸和电负性差异的减小,以及高温高压诱导的协同高熵效应。其强度的提升主要源于高固溶强化 和纳米尺度的化学波动。这一发现为在广泛的成分-温度-压力空间中探索具有优异力学性能的轻质单 相 CCA 提供了可行路径。[1]

关键词: 高压, 高温, 单相合金, 复杂成分, 高熵效应

参考文献

 M.L. Han et al., Lightweight single-phase Al-based complex concentrated alloy with high specific strength, Nat. Commun., 15, 7102 (2024).

新型 5d 锇基钙钛矿的高压合成及其奇异磁性研究

陈洁

北京理工大学物理学院 Email: jiechen.jc@outlook.com

摘要:

得益于高压高温合成条件的发展,5d 过渡金属锇基氧化物材料的独特物性得到广泛关注和持续研究,例如首个铁电金属 LiOsO₃,以及在钙钛矿 NaOsO₃ 中发现的伴随反铁磁转变的金属绝缘体转变现象。 钙钛矿 KOsO₃ 的合成进一步拓展了 A¹⁺Os⁵⁺O₃ 锇基三元氧化物的探索,为 5d 与 3d、4d 过渡金属钙钛矿 的比较研究提供了材料基础。

钙钛矿 KOsO₃ 的磁性表征以及中子衍射数据表明立方结构的钙钛矿 KOsO₃ 具有非公度磁序和弱铁 磁性(如图 1b 所示)。KOsO₃ 的电输运结果证明其具有金属性,与第一性原理计算结果吻合。钙钛矿 KOsO₃ 是迄今报道中唯一具有最高自旋态 t_{2g}³eg⁰电子构型的 5d 过渡金属钙钛矿氧化物,相较于相同电 子构型的 3d 和 4d 过渡金属钙钛矿氧化物,KOsO₃ 具有更大的电子能带宽度。钙钛矿结构的 KOsO₃ 表 现出正弦调制的磁矩与导电电子共存的现象,与哈伯德哈密顿模型在局域和巡游电子跨越区域的预测相 符(如图 1c 所示)。此外,经过细致的同步辐射变温结构研究,钙钛矿 KOsO₃ 在变温条件下展现出独 特的结构相变,研究发现与其电子结构的不稳定性紧密相关。在本次报告中,将针对该新型锇基钙钛矿 KOsO₃ 的高压合成以及独特物性作详细阐述,并与钙钛矿 NaOsO₃ 作对比分析以理解 5d 锇基钙钛矿的 独特物性演化和结构相变。

关键词: 高压合成、新型锇基钙钛矿、5d 过渡金属、非公度磁序

参考文献

- J. Chen, H. Li, J. Gainza, A. Muñoz, J. A. Alonso, J. Liu, Y.-S. Chen, A. A. Belik, K. Yamaura, J. He, X. Li, J. B. Goodenough, and J. S. Zhou, Exotic Magnetism in Perovskite KOsO₃, Phys. Rev. Lett., 132 (15), 156701 (2024).
- J. Chen, A. A. Belik, K. Yamaura, and J.-S. Zhou, New structural distortions in the osmate perovskite Na_{1-x}K_xOsO₃ synthesized under high pressure, Chem. Mater., 36, 5587-5595, (2024).
- J. Chen, J. He, Y. Zhang, S. Chariton, V. Prakapenka, K. Yamaura, J.-F. Lin, J. B. Goodenough, and J. S. Zhou, *In situ* structural determination of 3*d* and 5*d* perovskite oxides under high pressure by synchrotron x-ray diffraction, Phys. Rev. B 108 (13), 134106 (2023).

高压稳定新型稀磁半导体(Ba, K)(Zn, Mn)₂As₂的高居里温度

邓正、彭毅、靳常青

中国科学院物理研究所 Email: dengzheng@iphy.ac.cn

摘要:

稀磁半导体兼具半导体材料和磁性材料的双重特性,是破解后摩尔时代难题的候选材料之一。美国 国家科学研究委员会(National Research Council)早在 1991 年就指出稀磁半导体在信息通讯、处理和存储 等方面有着广泛的应用前景。2005 年《Science》创刊 125 周年之际发布的 125 个重大科学问题,其中 就包括"能否得到室温铁磁性半导体"。(Ga,Mn)As 为代表的 III-V 体系,是稀磁半导体中最广泛研究的 材料。但是在这些材料中,(Ga³⁺,Mn²⁺)的异价掺杂同时引入自旋和电荷,Mn 的含量难以有效提高,既 阻碍了材料居里温度的提升,也难以进行同质 PN 结的构建。自旋和电荷"捆绑"掺杂成为制约(Ga,Mn)As 等 III-V 体系进一步发展并走向实用化的主要瓶颈。

高压热处理可以突破许多材料中固溶度的限制,并稳定晶格畸变,我们使用 5.5GPa,800K 的高压 高温环境,成功将(Ba,K)(Zn,Mn)₂As₂的 Mn 掺杂浓度提高至 28%,达到了常压下 Mn 浓度的 2 倍,并且 MnAs4 四面体基元的规则构型也得到了保持。晶格常数随 Mn 浓度的增加而单调增加,这表明 Mn 确实 已经实现了有效的化学掺杂。磁化率测量表明随着 Mn 浓度的提高,材料的居里温度最高达到了 260K, 距室温铁磁性仅有一步之遥,并且其矫顽力也随着居里温度的提升而提高。不过随着 Mn 浓度的进一步 增加,居里温度反而下降,其矫顽力也随之降低。这应该是最近邻 Mn 之间的反铁磁相互作用逐渐增强 而导致的。结合第一性原理计算,我们认为如果可以相应地增加载流子浓度,那么最近邻 Mn 之间的反 铁磁相互作用将得到抑制,材料的居里温度将得到提高,甚至超过室温铁磁性。

关键词: 高压后处理, 稀磁半导体, 高掺杂浓度, 高居里温度

参考文献

^[1] Yi Peng, Xiang Li, Luchuan Shi, et. al., Advanced Physical Research 4, 2400124 (2025)

^[2] Z. Deng, C. Q. Jin, Q. Q. Liu, et al., Nature communications 2, 422 (2011).

^[3] K. Zhao, Z. Deng, X. C. Wang, et al., Nature communications 4, 1442 (2013).

^[4] K. Zhao, B. Chen, G. Zhao, et al., Chin. Sci. Bull. 59, 2524 (2014).

基于亲铁性的 5d 贵金属氮化物高压合成方法

雷力*、刘德璞、陶雨、吴彬彬、刘静仪、周春银、房雷鸣、李昊、

李林、贾旭、张恒源、贺端威

四川大学 原子与分子物理研究所 Email: lei@scu.edu.cn

摘要:

5d 贵金属(Os、Ir、Pt、Au)因 5d 轨道高电子填充率及相对论效应引发轨道收缩,与 氮气分子(N₂)的 946 kJ/mol 氮氮三键共同构成双重惰性体系。这种固有惰性导致其氮化物 合成长期受热力学限制,使得此类化合物潜在的物性至今未能被系统探索,形成基础研究与 应用开发的关键断层。目前,在极端压力条件下通过激光加热金刚石压砧技术成功实现了常 规方法难以合成的 PtN₂、OsN₂、IrN₂。但受限于产物尺寸仅为微米级,难以满足更广泛的物 性表征,且 Au-N 体系至今尚无高压合成报道。因此亟需探索新型合成策略,一方面突破样 品体积对物性表征的制约,另一方面通过突破传统路径以截获亚稳态新材料。

近期,我们基于 Pt 和 Au 高亲铁性特性,设计了一种新型高压偶联(high-pressure coupling, HPC)反应。以铁(Fe)为媒介,在大腔体压机可达的压力与温度条件下,成功制备出毫米级三元 M-Fe-N (M=Pt、Au)球形块体材料。通过中子粉末衍射、高压同步辐射 X 射线衍射等技术解析了该三元氮化物的结构特征。在此基础上,我们进一步针对 Au-Fe-N 体系开展了磁性及力学性能的表征。同步辐射 X 射线成像技术与 LVP 的结合,为合成过程的直观解析提供了优异探针。基于该技术,我们观测到 Au-Fe-N 材料的形成过程,首次实现了极端高压条件下 HPC 合成动态路径机制的直观可视化。

关键词: 5d 贵金属氮化物, 高压化学合成, 中子粉末衍射、同步辐射 X 射线成像

参考文献(中文小五号宋体,其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- 1. H. Zhang, B. Wu, J. Liu, Z. et al., Inorg. Chem, 2023, 62, 16, 6263.
- 2. L. Lei*, W. Yin, et al., Inorg. Chem, 2013, 52,13356-13362.
- 3. Yang, Ke, et al., Nuclear Science and Techniques. 35.6 (2024): 98.
- 4. Gregoryanz, et al., Nature materials. 3(5), 294-297.

高温高压下三元金属碳氮化物的合成研究

梁阿坤1,*

1宁波东方理工大学(暂名),宁波 315200,中国

akliang@eitech.edu.cn

报告摘要:

正如众所周知,压力能够促使电子在不同量子轨道间重新分布,从而引发电子去局域化效应。 这一改变不仅有助于合成常压下无法获得的非典型化合物,还能促成在常压条件下难以发生 的化学反应。然而,由于金刚石对顶砧中合成的样品体积极小(通常仅为几百纳米),且在 加热过程中存在温度不均以及初始材料间接触面积差异,常常导致所合成物质为多个相的混 合物。因此,在高压条件下准确解析合成产物的晶体结构具有极大挑战性。近年来,得益于 德国拜罗伊特大学 Dubrovinsky 教授和 Dubrovinskaia 教授发展起来的"多晶样品中的单 晶 X 射线衍射技术",在极端条件下对微小样品的晶体结构进行精准解析成为可能。^[1,2]本 次报告将包括两个部分:第一部分简要介绍该单晶衍射实验技术;第二部分以高压下的三元 金属碳氮化物为例,介绍我们在新型碳氮化合物合成与结构解析方面取得的最新进展。

参考文献:

[1]. Dubrovinsky, L. et al, Nature. 605, 274-278 (2022)

[2]. Aslandukov, A. et al, J. Appl. Cryst. 55, 1383-1391 (2022)

高温高压条件下金刚石内部缺陷调控

<u>刘晓兵</u>

曲阜师范大学物理工程学院 Email: xiaobing.phy@qfnu.edu.cn

金刚石中带负电氮空位色心(NV-)因其卓越的量子特性,被视为理想的固态量子系统,广泛的应 用于量子计算、量子通讯、精密探测及生物传感等领域^[1-5]。高质量 NV-色心量子金刚石是相关领域技 术持续发展的关键基础材料。然而,我国对量子钻石的需求严重依赖国际供应,西方国家对我国在先进 金刚石原材料及制备技术领域实施严密技术封锁。同时,领域内仍面临 NV-色心形成机制不清晰的科学 问题,极大的限制了高质量 NV-色心的可控制备。因此,我们致力于研究高温高压条件下 NV-色心的形 成机制与调控机理。

研究发现在金刚石生长过程中,NV^{0/-}色心择优生长在<111>晶向生长区域,同时 N₂V 色心择优生长 在<100>晶向生长区域^[6];在高温高压条件下,氮原子和空位的扩散显著增强,促使 IIa 原本无色心的区 域在退火过程中有效生成均匀弥散分布的单 NV⁻色心^[7]。与此同时,Ib 金刚石<100>晶向生长区域形成 高密度的集群色心,密度达 230 ppb^[6]。

进一步研究发现,高压条件下,通过调控氮原子的有效聚合以及晶格畸变场,可以实现对 NV-色心 自旋环境的有效净化,从而显著提升 NV-色心的相干性质。我们在 IIa 型金刚石中成功实现了 720 µs 的 自旋相干时间以及 30 MHz 的 PLE 光谱线宽,创下天然 ¹³C 丰度金刚石中 NV-色心自旋相干性质和光学 相干性质的最高水平^[7,8];同时,将 Ib 金刚石相干性质提升了 3 倍。此外,结合多切片电子叠层成像(MEP) 技术并辅以密度泛函理论模拟,我们首次实现了金刚石中 NV-色心的原子尺度成像,揭示了整体 NV 中 心在多个尺度上的三维原子结构及空间分布。我们的工作成功开发了一种无损制备高质量量子金刚石的 方法,为 NV-色心在量子技术中的应用奠定了坚实基础,也为未来进一步提升其相干性提供了重要指导, 并为相关领域的研究提供了新的视角与思路。

关键词:量子金刚石,氮空穴色心,高温高压技术,缺陷调控

参考文献

- 1. Doherty M W, Manson N B, Delaney P, Jelezko F, Wrachtrup J and Hollenberg L C L, The nitrogen-vacancy colour centre in diamond, Phys. Rep. 528, 1, 2013.
- 2. Abobeih M. H., Wang Y., Randall J., Loenen S. J. H., Bradley C. E., Markham M., et al. Fault-tolerant operation of a logical qubit in a diamond quantum processor. Nature 606, 884-889, 2022.
- 3. Randall J., Bradley C, van der Gronden F., Galicia A., Abobeih M, Markham M., et al. Taminiau. Many-body-localized discrete time crystal with a programmable spin-based quantum simulator. Science 374, 1474-1478, 2021.
- 4. Casola F., van der Sar T., Yacoby A. Probing condensed matter physics with magnetometry based on nitrogen-vacancy centres in diamond. Nat. Rev. Mater. 3, 17088, 2018.
- 5. Hermans S. L. N., Pompili M., Beukers H. K. C., Baier S., Borregaard J., Hanson R, Qubit teleportation between non-neighbouring nodes in a quantum network. Nature 605, 663-668, 2022.

高温高压技术在热电材料领域中的应用

暨 N 型高温氧化物热电陶瓷的高压制备与性能优化

马红安、李欣健、于海东、高姗、贾晓鹏

高压与超硬材料全国重点实验室,吉林大学物理学院,长春130012 Email: <u>maha@jlu.edu.cn</u>

摘要:

工业废热发电和深空探测用 RTG 温差发电驱动着新一代高性能氧化物热电材料的发展。高温氧化物热电材料具有环境友好、高温下良好的化学稳定性和热稳定性、良好的力学性能、储量丰富、原料廉价等优势。但氧化物热电材料尤其是 N 型氧化物材料的热电性能普遍较低,其高的电阻率和热导率是制约其热电性能提升的关键因素。探索新型氧化物热电材料体系,调控其宽带隙,并协同优化电声输运,提升其热电性能是目前该领域的前沿和挑战性课题。高温高压合成技术提供了独立于温度和化学组分之外的更大范围内调控材料晶体结构、电子结构、化学组分和微观组织并进而优化材料性能的新手段和新途径,在热电材料的研究中已经显现出其独特的优势。高压原位研究已表明,高压可有效提升半导体氧化物材料的电导率,而高温高压技术可有效截获材料在高压下的优异性能。本报告将介绍大腔体高压合成技术在制备块体热电材料方面的应用,并总结高温高压手段对几种典型热电材料热电输运性能的调制规律和优化机制,重点介绍 N 型高温氧化物热电陶瓷的高压制备与性能优化策略。

关键词: 高温高压,氧化物热电陶瓷,微观结构,热电性能

参考文献

- Xinjian Li, Xiaohuan Luo, Moran Wang, Tu Lyu, Chaohua Zhang, Fusheng Liu, Hongan Ma, Lipeng Hu, High-pressure modulation of band gap and microstructure in N-type high-entropy strontium titanate for enhanced thermoelectric performance, Microstructures 2025, 5, 2025008.
- Haidong Yu, Peng Yang, Lina Jiang, Xinjian Li, Wenting Ji, Shan Gao, Yaqi Chen, Yuewen Zhang, Hongan Ma, Xiaopeng Jia, Improvement of thermoelectric properties of xNb:(1-x)SrTiO3 composite ceramics by high-pressure high-temperature synthesis, Ceramics International 50 (2024) 20160–20166.
- Shan Gao, Haidong Yu, Peng Yang, Yuewen Zhang, Hongan Ma, Xiaopeng Jia, Improved thermoelectric properties of SrTiO3-based ceramic/CNTs composite synthesized via high-temperature and high-pressure method, Ceramics International 50 (2024) 42748–42754.
- Shan Gao, Peng Yang, Xinjian Li, Wenting Ji, Haidong Yu, Yaqi Chen, Yuewen Zhang, Hongan Ma, Xiaopeng Jia, Optimization of thermoelectric properties in La–Nb-doped bulk SrTiO3 synthesized by HPHT method, Ceramics International 50 (2024) 15172–15181.

增强型钛酸铅基负热膨胀新材料的设计、高压制备与机理研究

<u>潘昭1</u>、龙有文1、陈骏2、Masaki Azuma3、邢献然2

¹中国科学院物理研究所 ²北京科技大学 ³Tokyo Institute of Technology Email: zhaopan@iphy.ac.cn

摘要:

众所周知, 钛酸铅是一种典型的钙钛矿型铁电材料。值得注意的是,除了铁电性以外, 钛酸铅还表 现出独特的负热膨胀性,即宏观体积随着温度的升高而收缩。钛酸铅的负热膨胀性为调控压电/铁电材 料和器件的热膨胀系数提供了可能,将具有负热膨胀性的材料与常规正膨胀材料进行复合,就可能有效 地的调控材料的热膨胀系数,甚至是实现零膨胀。然而,当前绝大多数化学掺杂都使得钛酸铅的负热膨 胀性削弱、负热膨胀温度区间变窄,很大程度上限制了其应用^[1,4]。近年来,我们采用先进的高压高温 合成技术,设计和制备了一系列强极性钛酸铅基钙钛矿材料,进一步增强了钛酸铅的晶格畸变及铁电性, 有效地改善了钛酸铅的负热膨胀性,获得了兼具宽温区和强负热膨胀性的新材料^[5,6]。此外,我们利用 高能同步辐射和中子衍射等大科学装置对材料在不同温度下的晶体结构和磁结构进行了精细研究,并结 合第一性原理计算,揭示了钛酸铅基钙钛矿材料的负热膨胀机理,从而为实现热膨胀系数可控的钛酸铅

关键词: 负热膨胀、高压高温合成、钙钛矿、钛酸铅、热膨胀系数 参考文献

- 1. T. A. Mary, et al., *Science* **1996**, *272*, 90.
- 2. Y. W. Long, et al., Nature 2009, 458, 60.
- 3. M. Azuma, et al., Nat. Commun. 2011, 2, 347.
- 4. J. Chen, et al., Chem. Soc. Rev. 2015, 44, 3522.
- 5. Z. Pan, et al., J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 14865.
- 6. Z. Pan, et al., Chem. Mater. 2022, 34, 2798.

138

氮基高能量密度材料的研究

王贤龙

中国科学院合肥物质院固体物理研究所 Email: xlwang@theory.issp.ac.cn

摘要:

高能量密度材料是一类能够短时间内产生极大能量的物质,氮基含能材料是其典型的代表,第一性 原理、高压实验和等离子体增强 CVD 方法极大地推动了该领域发展,报告将系统介绍氮基高能量密度 材料的含能机制、合成机理和发展历程,以及我们在高含能氟-氮、立方偏转聚合氮(cg-N,金刚氮) 的研究进展。发现降低压力时 cg-N 的分解机制是表面失稳,提出了能将其在常压下稳定到 477 ℃的机 理和方法;在此基础上,提出了用更安全和更便宜的叠氮化钾为前驱体,采用等离子体增强 CVD 方法, 在常压下合成了无束缚的 cg-N,并研究了其环境稳定性、热分解行为和爆轰性能,表明 cg-N 具有典型 的含能材料热分解特征和高达 488 ℃的热分解温度,进一步开发出了更为简便的一步制备法。



图 1 立方偏转聚合氮样品的 TD-DSC 结果

关键词: 氮基高能量密度材料, 立方偏转聚合氮, 表面稳定性参考文献

- Route to Stabilize Cubic Gauche Polynitrogen to Ambient Conditions via Surface Saturation by Hydrogen, Chin. Phys. Lett. (Express Letter) 40, 086102 (2023)
- 2. Free-standing cubic gauche nitrogen stable at 760 K under ambient pressure, Science Advances 10, eadq5299 (2024)
- 3. One-step synthesis of cubic gauche polymeric nitrogen with high yield just by heating, Chin. Phys. B 33, 126802 (2024)
- Realized stable BP-N at ambient pressure by phosphorus doping, Matter and Radiation at Extremes (Letter) 10, 015801 (2005)

压致双态转换材料与器件

王永刚 1,2*

¹北京大学材料科学与工程学院,北京市海淀区颐和园路5号,100871 ²北京高压科学研究中心,北京市海淀区西北旺东路10号,100094

*Email: ygw@pku.edu.cn

压力(压强)与温度同为重要的热力学参数和外界刺激条件,高压不仅能引起材料物性的变化, 通过合理设计还能获得亚稳材料,相当于一种特殊的化学合成手段。我们课题组在过去的数十年中, 在高压尺度下进行新型双态转换现象、材料和器件化的探索,基于金刚石对顶砧发现了数十种压致 双态转换新现象和新材料,如压致自旋转换、压致 p-n 转换、压致倍频转换和压致发光转换等。在 此基础上,还初步进行了材料器件化的尝试,如利用压力梯度构筑横向异质结、倍频效应的循环三 态转换等。这些研究结果丰富了外界刺激响应类型的双态转换材料,与温度、光照、磁场等外界条 件形成有益的对比,还为常压下的双态转换材料设计提供参考,并充分体现了固体化学思想在高压 科学研究中的重要作用。



Fig. 1 Pressure-induced bistable phenomena and materials

关键词: 高压; 双稳态转换; 自旋交叉; 光/电功能材料

参考文献

- [1] C. Li, Y. Wang,* et al. Adv. Mater., 2024, 36, 2407922.
- [2] D. Jiang, Y. Wang,* et al. J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 23508.
- [3] D. Jiang, Y. Wang,* et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202116656.
- [4] T. Wen, Y. Wang,* et al. J. Am. Chem. Soc. 2019, 141: 505.

非晶氧化硼晶界增强的高强度、高弹塑性氮化硼复合陶瓷

武英举

清华大学航天航空学院清华大学力学与工程交叉研究院,北京,100084 Email: yingjuwu@mail.tsinghua.edu.cn

摘要:

在大多数材料体系中,强度与可变形性往往呈现相互排斥的关系。陶瓷材料以其轻质、高强度等优 异特性而备受关注,但其在室(低)温环境下的变形能力却极为有限,断裂应变通常不足1%,且缺乏 塑性。一旦达到或接近其弹性极限,陶瓷材料极易发生灾难性断裂失效,这严重制约了其作为关键结构 构件的可靠性和安全性。为此,我们提出了一种通过构建超薄非晶晶界来协同提升多晶陶瓷块材强度和 室(低)温变形能力的策略。具体而言,我们通过预氧化工艺将非晶氧化硼(B2O3)均匀引入到不同的 氮化硼(BN)纳米前驱体中,并通过火花等离子烧结(SPS)制备了多种 BN/B2O3 致密复合陶瓷块体。 实验结果表明,得益于超薄非晶晶界的协同变形能力以及 BN 纳米片三维互锁结构对局部变形的限制作 用,这些复合陶瓷的强度和弹塑性变形能力均得到了显著提升。此外,这些高强度、高弹塑性的 BN 复 合陶瓷还展现出优异的能量吸收能力和抗疲劳能力,为极端环境下的可靠密封部件或阻尼元件提供了材 料基础。



图 1 TS-BN/B₂O₃ 复合陶瓷的微观组织结构和室温单轴压缩应力-应变曲线 关键词:非晶晶界,协同变形,三维互锁结构、高弹塑性

新型全过渡金属高阶有序钙钛矿氧化物的高压制备和物性研究

王潇

河南省科学院量子材料与物理研究所 Email: xwang@hnas.ac.cn

摘要:

高阶有序钙钛矿氧化物是由 ABO₃ 型钙钛矿的 A 位形成特殊的 1:3 有序、且 B 位形成岩盐序而形成 的演生结构,具有化学式 AA'₃B₂B'₂O₁₂。在此类结构中,A、A'、B 和 B'位均可被多种离子,特别是过 渡金属离子占据,具有极为丰富的磁电相互作用,可以产生新颖的物性和优异的材料性能,是实现新型 磁电量子功能材料的重要材料体系之一。特别地,由于 A 位与配位氧阴离子构成较大的 AO₁₂十四面体 (A-O 键长~2.7 Å),往往被大尺寸的碱金属、碱土金属或稀土金属占据。目前,A 位由小尺寸、强磁 性 3*d* 元素占据的全过渡金属高阶有序钙钛矿氧化物的报道仍相当罕见。利用高压制备手段的独特优势, 我们成功制备得到了新型全过渡金属高阶有序钙钛矿氧化物 ACu₃Fe₂Os₂O₁₂ (A = Co、Cu)。研究表明 该材料具备多种物理和材料特性,包括室温强磁性、半金属性以及低热导性质等,并揭示其多种磁性离 子独立或协同诱导这些特性的微观机理。本研究为新型磁电材料的结构设计、高压制备和物性调控提供 了新的思路,并为新型磁电量子功能器件的应用提供新的材料基础。



图 1 (a)ACu₃Fe₂Os₂O₁₂ (A = Co、Cu)的晶体结构; (b)A 位离子对费米面调控的示意图; CuCu₃Fe₂Os₂O₁₂ 的(c)容忍因子和(d)A-O 键长与同类材料的比较。

关键词: 高压制备; 钙钛矿; 磁电耦合; 自旋电子学; 强关联体系

纳米结构下的高压相截获过程

<u>肖天元</u>

四川大学化学工程学院 Email: tyxiao@scu.edu.cn

摘要:

合成新型晶体相是开发功能性材料的重要手段,其中在常压环境中稳定高压相晶体结构是获得新型 功能性材料的有效途径。在加压过程中,固体材料的相变以晶畴为单位发生,从而晶畴的结构对高压相 结构的稳定起到重要的作用,系统性的调控高压相晶畴的精细结构成为控制高压相稳定性的关键因素。 通过纳米晶作为前驱体,利用其表面配体、表面/体相化学组分高度可调的优势,系统的分析了不同化 学组分材料的高压相截获条件,得出了纳米晶表面配体构造及纳米晶表面化学组分是决定高压相稳定性 的关键因素。在纳米尺度下,高压相晶畴间发生固-固反应,所形成的三维交连纳米结构所带来的缺陷 湮灭及晶畴互锁效应可有效的提高相变反应活化能,从而实现高压相晶体结构的可控截获。通过纳米晶 调控表面配体结构及化学组分实现高压相截获的方法,不仅拓展了高压相材料的制备途径,也为高压相 材料的实际应用奠定了基础。



图 1, 三维交连纳米结构通过调控相变反应活化能实现高压相的可控截获。

关键词: 高压相截获, 高压相变, 新材料, 纳米结构

参考文献

 Xiao, T., Nagaoka, Y., Wang, X., Jiang, T., LaMontagne, D., Zhang, Q., Cao, C., Diao, X., Qiu, J., Lu, Y., Wang, Z., Cao, Y. C., Nanocrystals with metastable high-pressure phases under ambient conditions, *Science* 2022, 377, 870-874.

物质模拟软件 ARES 及其在极端条件下材料设计应用

谢禹、李家祥、杨欣、吕健、刘寒雨

吉林大学物理学院 Email: xieyu@jlu.edu.cn

在高压、高温等非标准条件下,材料的结构稳定性与物理性质呈现出复杂的依赖关系,这对理论建 模提出了严峻挑战。为应对这一问题,我们开发了第一性原理材料模拟软件 ARES (*Ab initio* atomic mateRial modEling Software at JLU)。ARES 基于实空间有限差分与平面波方法,具有高精度与优异的 并行扩展性,能够高效执行复杂体系的电子结构计算、结构优化及分子动力学模拟任务。为了提升材料 预测能力,ARES 集成了机器学习模块,支持基于主动学习的结构搜索与高精度机器学习势函数构建。 在确保计算精度的前提下,大幅降低了大规模结构模拟的成本。通过高通量结构搜索与机器学习加速的 势能面建模相结合,ARES 成功识别并预测了多种高压稳定相及其相关性质。尤其在多元复杂体系中, ARES 展现出对潜在稳定结构的高效发现能力。例如在 Mg-Ca-H¹和 M-B²等体系中,ARES 结合机器 学习方法,成功识别出多个潜在的高温超导体。目前,ARES 已广泛应用于氧化物、硼化物、氢化物 等材料体系,在理论预测与实验验证之间架起了重要桥梁,为新材料的高效发现与性能调控提供了强有 力的技术支撑。

关键词: 第一性原理计算软件、结构预测、机器学习加速、高温超导参考文献

1. J. Li *et al.* Enhancing the Efficiency of Complex Systems Crystal Structure Prediction by Active Learning Guided Machine Learning Potential, arXiv:2505.08159 (2025)

2. X. Yang *et al.* Prediction of fully metallic σ-bonded boron framework induced high superconductivity above 100 K in thermodynamically stable Sr₂B₅ at 40 GPa, arXiv:2310.13945 (2023)

Synthesis, structural stability, sound velocities, thermoelasticity, and strength of novel high-entropy alloys at high *P-T* conditions

Yongtao Zou

College of Engineering Physics, Shenzhen Technology University, Shenzhen 518118, China

E-mail: zouyongtao@sztu.edu.cn

Abstract

Recently, the state-of-the-art techniques of LVP-based (Large Volume Press) ultrasonic interferometry combined with synchrotron x-ray diffraction and x-ray radiographic imaging have resolved the challenge for directly measuring sound velocities of opaque metals or alloys at high pressure, and have enabled measurements of simultaneous compressional and shear wave velocities of novel high-entropy materials at high pressure and/or high temperature. Based on the measured sound velocities and synchrotron x-ray data, the structural stability/phase transition, thermoelasticity and strength, and their pressure and temperature dependences, as well as the elastic-correlated physical properties can be derived. Here, we will introduce the newly established "High-Pressure Physics Laboratory" of Shenzhen Tech. University, and the effects of nitrogen and porosity on the structural stability, sound velocities, thermoelasticity, and strength of novel high-entropy carbonitrides at high pressure and high temperature using synchrotron-based ultrasonic interferometry in a large volume press.



Figure 1. (a) Photos of high-pressure physics laboratory at Shenzhen Tech. University;(b) Examples of ultrasonic echoes of high-entropy carbonitride at high pressures and temperatures; (c). Grain size and yield strengh of high-entropy carbides at high pressure

References

- [1] Yongtao Zou*, *et al*, Elasticity and enhanced fracture toughness in Nb-doped TiZrHf medium-entropy alloys by metastability engineering, *Appl. Phys. Lett.*, 125, 061904 (2024).
- [2] Yongtao Zou*, et al, High-pressure elasticity of novel (VNbTaTi)C high-entropy carbides, J. Europ. Ceram. Soc., 44, 7504 (2024).
- [3] Yongtao Zou*, *et al*, Unveiling pressure-induced anomalous shear behavior and thermoelasticity of α-Fe₂O₃ hematite at high pressure, *iScience*, 28, 111905 (2025).
- [4] Yongtao Zou*, *et al.*, Unraveling Microstrain-promoted structural evolution and thermal-driven phase transition in *c*-Sc₂O₃ nanocrystals at high pressure, *Physical Review B*, 102, 214115 (2020).
- [5] Yongtao Zou*, *et al.*, Thermally induced anomaly in the shear behavior of Fe₃O₄ magnetite at high pressure, *Phys. Rev. Appl.*, 10, 024009 (2018).
- [6] Yongtao Zou*, et al., Thermoelasticity and anomalies in the pressure dependence of phonon velocities in niobium, Appl. Phys. Lett., 112, 011901 (2018).

几种磁电量子功能材料的高压制备与物性研究

龙有文

中科院物理所

ywlong@iphy.ac.cn

摘要: 磁电量子功能材料为量子科技的发展提供材料支撑,是凝聚态物理与材料 科学的重要研究方向。高压制备可稳定反常电子态与特殊晶体结构,该技术已成 为探索发现新型磁电量子功能材料的重要手段。本人带领的课题组长期从事新型 磁电量子功能的高压高温制备及结构与综合物性研究,发挥高压制备优势已发现 40 余种新材料体系。本次报告将汇报课题组近期在磁电量子功能领域的进展,包括在高压制备的 A 位有序钙钛矿 CaFe3Ti4O12 中实现磁场可调控的位移型铁电 极化与显著磁电耦合效应[1],在 CaCuFe2O5 中观察到反常压缩型 CuO6 八面体及 其诱导的新型磁结构[2],通过结构设计首次实现 A 位有序四重钙钛矿的本征庞磁阻效应[3],在高压新材料 CaCu2Ni2Os2O12 中实现高温亚铁磁相变及其诱导的 金属-绝缘体相变等[4]。

离子层状结构基元数据库的构建及其在功能材料设计中的应用

<u>邓俊</u>¹、应天平²、郭建刚²、杜世萱²、陈小龙²、胡清扬¹、缑慧阳¹

1 北京高压科学研究中心

2 中国科学院物理研究所

Email: jun.deng@hpstar.ac.cn

摘要:

固体层状材料由准二维基元堆垛而成,根据这些基元层间相互作用可分为范德华层状材料和离子型 层状材料。近十几年来,电中性的二维范德华基元数据库已经有了系统的构建,极大推动了二维材料领 域发展。然而对于带电离子型层状材料的搜索与分类仍然较少,限制了其进一步发展。在本报告中,我 们将介绍近几年我们在离子型层状基元数据库的构建、材料设计以及压力诱导物性的进展。

首先,我们发展了拓扑缩放算法,对材料数据库中带电二维基元进行了识别并构建了离子型基元数 据库。基于该数据库,结合电荷和晶格匹配准则设计了 353 个具有热力学和动力学稳定性的材料,并发 现了几种超导体、双极磁性半导体和具有反常谷霍尔效应的铁谷材料以及拓扑材料。

其次,利用该数据库,我们设计了7种含单层Pb的层状超结构ROPb(R = La/Nd)和R₂O₂Pb(R = La/Sm/Gd/Y/Er),且费米能级附近主要由Pb-p贡献,呈现二维化特点。我们对预测的几种结构在实验上进行了合成,并通过高压调节层间相互作用,在R₂O₂Pb中诱导出了超导电性。值得注意的是在高压下Gd₂O₂Pb中存在超导和磁性共存现象。

最后,我们发现部分离子型层状基元在高压下易发生形变并伴随物性突变。例如,在LiSn₂As₂中, 具有三方对称性的SnAs层在高压下转变为四方晶格,实验亦验证了该结构相变及随之增强的超导性。 进一步分析表明,As的4p电子轨道在压力下发生了轨道重取向,从而提高了超导转变温度。

关键词:离子型层状基元、含单层 Pb 层状结构、SnAs 基元、超导电性、磁性、压力

参考文献

- J. Deng, J. B. Pan, Y. F. Zhang, S. X. Du, Database construction of two-dimensional charged building blocks for functional-oriented material design, Nano Lett. 23, 4634 (2023)
- X. Chen*, J. Deng* (co-first author), S. F. Jin, T. P. Ying, G. Fei, H. F. Ren, Y. F. Yang, K. Ma, M. Z. Yang, J. J. Wang, Y. C. Li, X. Chen, X. B. Liu, S. X. Du, J. G. Guo, and X. L. Chen, Two-Dimensional Pb Square Nets from Bulk (RO)_nPb (R = Rare Earth Metals, n = 1, 2), J. Am. Chem. Soc. 145, 17435 (2023).
- J. J. Wang*, T. P. Ying*, J. Deng*(co-first author), C. Y. Pei, T. X. Yu, X. Chen, Y. M. Wan, M. Z. Yang, W. Y. Dai, D. L. Yang, Y. C. Li, S. Y. Li, S. S. Iimura, S. X. Du, H. Hosono, Y. P. Qi, J. G. Guo, Superconductivity in an Orbital-Reoriented SnAs Square Lattice: A Case Study of Li_{0.6}Sn₂As₂ and NaSnAs, Angew. Chem. Int. Ed. 135, e202216086 (2023)

N18 环:一种可以跨维度构筑新型聚合氮结构的基本结构单元

高玉香、张盈,刘爽,金博,郭琳琳,郭旭,姚震,王鹏,刘冰冰 吉林大学 高压与超硬材料全国重点实验室 Email: yxgao22@mails.jlu.edu.cn

摘要:

利用环状结构单元跨维度创制新材料是材料科学的前沿研究领域。在聚合氮体系中,到目前为止还没 有报道任何基本结构单元部分。在这里,我们首次成功合成了以 N₁₈ 环为构筑基元的褶皱一维带状和 二维层状聚合氮框架结构,并利用稀土元素镧实现了新型聚合氮结构的稳定化。同时,压力可以调控 N₁₈环的聚合形式,形成不同维度的聚合氮框架结构,获得了聚合氮框架的维度扩展的规律。并且,这 两种由 N₁₈环构成的聚合氮结构均具有优异的含能特性。该工作揭示了 N₁₈环可以作为聚合氮材料的一 类基本构筑基元,为扩展氮家族,设计、合成多维度的新型聚合氮材料提供了新策略。



图 1 基于 N18结构单元构建的一维纳米带与二维层状聚合氮结构合成路径示意图

关键词:聚合氮;构建单元;N₁₈环;高压;高能量密度材料 参考文献

1. Yuxiang Gao, Ying Zhang, Shuang Liu, Bo Jin, Linlin Guo, Xu Guo, Zhen Yao, Peng Wang, Bingbing Liu. N18 ring: a building block for constructing 1D and 2D polymeric nitrogen frameworks. Science Bulletin 2024;69(24): 3860-3866.

偏应力诱导的自陷态激子发光转化

吕超凡、杨西贵

郑州大学物理学院 Email: lvchaofan20@mails.ucas.ac.cn

摘要:

自陷态激子(STE)发光源于激子与晶格强电声耦合,具高荧光量子产率、宽光谱特征,近年在多 材料体系快速发展,为白光发光二极管、闪烁体等领域带来新机遇。研究显示,高压驱动晶格畸变可促 进自由激子向 STE 转化,杂质掺杂与势阱引入能诱导多 STE 共存或激活暗态发光。但多 STE 共存下的 载流子弛豫动力学及竞争关系不明,制约性能精准调控,亟需建立关联模型并开发新型调控策略。

针对上述问题,本研究选取具有本征 STE 发光(STE-1)的 ZnO,通过设计晶体形貌与传压方式,构建梯度偏应力高压实验体系,研究偏应力触发新 STE-2 发光及 STE-1 到 STE-2 转化现象,解析了其 微观应变原理与动力学过程,实现了对 STE 转化过程的调控,主要成果如下:

(1)偏应力触发新 STE-2 发光:构建梯度偏应力高压实验体系,经有限元模拟发现偏应力会导致 塑性屈服应变,且其分量增加可降低临界压力值。实验观测到偏应力触发新 STE-2 发光,呈激子发光 性质,二者激活压力负相关,梯度偏应力可以使 STE-2 激活压力从 6.0 GPa 降至 0.18 GPa。

(2) 偏应力诱导 STE 转化动力学研究:选取金字塔形 ZnO 纳米晶与硅油传压,原位应变监测发现纳米晶沿[002]晶向在 0.9 GPa 和 5.8 GPa 下发生两阶段塑性应变。DFT 计算表明,塑性应变使带隙减小并产生局域势阱:第一阶段形成势阱促激子自陷生成 STE-2,延缓 STE-1 寿命;第二阶段势阱密度增大,加速 STE-1 向 STE-2 转化。最终在偏应力驱动下,发光从 2.34 eV 黄绿光完全转为 2.88 eV 深蓝光,并且强度提升 10 倍。



图1 偏应力诱导自陷态激子发光转化示意图

关键词:高压,自陷态激子,氧化锌,偏应力 参考文献

 Lv, C.; Yang, X.; Wu, Y.; Lei, F.; Liang, Y.; Yang, D.; Sui, L.; Qin, J.; Wu, Q.; Lai, S.; Liu, H.; Zang, J.; Cheng, S.; Liu, K.; Shan, C. Deviatoric Stress-Induced Transition of Self-Trapped Exciton Emissions. Nat Commun 2025, 16 (1), 1913.

重费米子材料 Ce₃CrAs₅的高压合成及物性研究

<u>闵保森</u>^{1,2}、张俊¹,望贤成^{1,2*},靳常青^{1,2*}

¹中国科学院物理研究所,北京 100190 ²中国科学院大学物理学院,北京 100049 Email: wangxiancheng@iphy.ac.cn; Jin@iphy.ac.cn

摘要:

我们报道了在高压高温条件下合成的新型化合物 Ce₃CrAss 的结构和性能。其晶体结构为六方晶系, 空间群为 P6₃/mcm,对应空间群号为 193,以 Hf₅Sn₃Cu 反型结构结晶,沿 c 轴具有锯齿状 Ce 链。该化 合物在 T=6 K 和 T=13 K 时出现磁性行为拐点,有效磁矩分析表明 Ce 与 Cr 间磁交换相互作用使化合物 呈现类铁磁特征。索末菲系数约为 220mJ/(Ce-mol•K²),表明其具有重费米子行为。电阻率在 40 K 左右具有一个峰,这是由晶体电场(CEF)和磁散射的协同作用引起的,Ruderman-Kittel Kasuya-Yosida (RKKY)相互作用在 Ce₃TiAs₅ 中仍然占主导地位。





图 2 Ce3CrAs5 的电阻随温度变化曲线

图 1 Ce₃CrAs₅ 的晶体结构 关键词: 铬基砷化物; 重费米子; 高压高温合成; 类铁磁

参考文献

- 1. L C Fu et al. J. Phys.: Condens. Matter 37 015803(2025).
- 2. Duan, L., Wang, X., Zhan, F. et al. Sci. China Mater. 63, 1750–1758 (2020).

Uniaxiality-Induced Reduced-Pressure Synthesis of Ultrahard Paracrystalline Diamond

Yue Pan^{1,4}, Xiaohong Yuan^{1,4}, Yong Cheng², Baoyin Xu¹, Shucheng Liu¹, Zhitong

Wang¹, Shida Wang¹, Kuo Hu^{1, *}, Shengcai Zhu^{3, *}, Quanjun Li¹, Ming-sheng

Wang², Zhaodong Liu¹, Hu Tang^{1,*}, Bingbing Liu^{1,*}

¹State Key Laboratory of Superhard Materials, Synergetic Extreme Condition High-Pressure Science Center, College of Physics, Jilin University, Changchun, 130012, China

²Department of Materials Science and Engineering, College of Materials, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361005, China

³School of Materials, Shenzhen Campus of Sun Yat-sen University, Shenzhen 518107, China ⁴These authors contributed equally to this work.

Email: hutang@jlu.edu.cn; hukuo@jlu.edu.cn; zhushc@mail.sysu.edu.cn; liubb@jlu.edu.cn Abstract: Synthesizing fully sp^3 -bonded non-crystalline carbon remains a long-standing challenge due to the intrinsic instability of the sp³ bond at ambient pressure. Recently, paracrystalline diamond, a new-form sp^3 -bonded non-crystalline carbon consisting of sub-nanometer-sized paracrystallites, has been synthesized from face-centered cubic C₆₀ at 30 GPa, which has attracted attention due to its unique structural features and excellent physical properties. However, the ultrahigh synthesis pressure of paracrystalline diamond poses an obstacle to its large-scale production and applications. In this study, paracrystalline diamond was synthesized at an exceptionally low pressure (16 GPa) via inducing uniaxiality at high-pressure and high-temperature conditions, thereby breaking through the temperature-pressure phase diagram of C₆₀. By combining structural characteristics and advanced molecular dynamics simulation, the remarkable reduction of synthesis pressure is attributed to the fact that the symmetry of the C_{60} cage is broken due to the uniaxiality, which further allows the C₆₀ cage to collapse at much lower pressures. This work reveals the critical role of uniaxiality in the reduced-pressure synthesis of paracrystalline diamond, which may provide a potent methodological strategy for the development of novel low-cost high-pressure materials. (Pan, X. Yuan, Y. Cheng, B. Xu, S. Liu, Z. Wang, S. Wang, K. Hu, S. Zhu, Q. Li, M. Wang, Z. Liu, H. Tang, B. Liu, Advanced Materials 2025, DOI 10.1002/adma.202500037.)



Fig1 *P*-*T* phase diagram of C₆₀.

Keywords: paracrystalline diamond, uniaxiality, high-pressure and high-temperature, molecular dynamics simulation

References

1. H. Tang, X. Yuan, Y. Cheng, H. Fei, F. Liu, T. Liang, Z. Zeng, T. Ishii, M. S. Wang, T. Katsura, H. Sheng, H. Gou, *Nature*. 2021, 599, 605.

2.X. Yuan, G. Chen, Y. Cheng, S. Zhu, F. Liu, Y. Ke, K. Hu, Y. Pan, M.-S. Wang, Z. Liu, H. Tang, B. Liu, Sci Bull 2025, 70, 1257.

3.H. Tang, Y. Cheng, X. Yuan, K. Zhang, A. Kurnosov, Z. Chen, W. Xiao, H. S. Jeppesen, M. Etter, T. Liang, Z. Zeng, F. Wang, H.

Fei, L. Wang, S. Han, M.-S. Wang, G. Chen, H. Sheng, T. Katsura, Nat Mater. 2023, 22, 1189.

4.S. cai Zhu, X. zhi Yan, J. Liu, A. R. Oganov, Q. Zhu, Matter 2020, 3, 864.

高温高压合成和烧结耐高温高强度碳化锆陶瓷材料

彭放 杨鹏

四川大学 原子与分子物理研究所

Email: pengfang@@scu.edu.cn

碳化锆材料以其内部强的 Zr-C 共价键和原子扩散系数极低而具有优异的力学性能和热稳定性,作为高强度、高温陶瓷材料成为现代工业、航空航天和国防领域不可缺的材料之一。 采用传统常压方法合成和烧结高强度、高性能的 ZrC 陶瓷材料还存在一定困难。本文采用大腔体压机高温高压装置在高温高压下对碳化锆材料进行了合成和烧结研究,通过研究解决了 传统常压方法合成和烧结碳化锆材料中的一些难以克服的问题,成功的合成出了高纯碳化锆 粉体材料和烧结出了高强度碳化锆陶瓷材料。研究发现:采用微米级的高纯石墨粉和含氢的 锆粉作为前驱体,在5.0 GPa、1000-1200℃温度时,反应产物为 ZrC、ZrC0.67H0.33和 Zr2CH 的混合物,氢元素未完全脱离,氢元素以固溶形式暂时滞留在碳化锆晶格中,形成亚稳态的 富氢碳化锆相。在 1400-1800℃时,产物为单一立方相碳化锆。研究表明高温高压固相反应 合成碳化锆具有显著优势,可以在相对较低的温度(<2000 ℃)合成纯相碳化锆材料。同 时在 5.0 GPa 压力和 1300 ℃条件下烧结出无添加剂纯相 ZrC 碳化锆陶瓷,其维氏硬度达到 27.4 GPa,断裂韧性为 4.3 MPa•m1/2,分别比常压烧结文献报道的实验值至少提高 29 % 和 39%,相对密度接近 98.5%,杨氏模量为 412 GPa。

关键词:碳化铅陶瓷;高温高压;合成与烧结;力学性能

0

在后尖晶石氧化物中发现压缩的 CuO。八面体及奇异的自旋结构

皮茂材、沈瑶、龙有文

中国科学院物理研究所 中国科学院大学物理科学学院

Email: pimaocai@iphy.ac.cn, yshen@iphy.ac.cn, ywlong@iphy.ac.cn

摘要:

CuO₆八面体通常呈现拉长畸变,导致*d_{x²-y²}*轨道活化并形成面内交换作用;而具有*d_{3z²-r²}*轨道活化 与单向交换作用的压缩型 CuO₆八面体极为罕见。本研究通过高压高温技术设计并合成了新型阻挫反铁 磁体 CaCuFe₂O₅,其结构中实现了稳定的压缩型 CuO₆八面体,将包含 zigzag 型自旋梯的 Fe₂O₅层分隔开。 磁化率与比热测量表明体系在奈尔温度 165 K 以下呈现长程反铁磁序,中子衍射实验进一步验证了这一 结论。详细的磁结构精修揭示了 C 型自旋结构,其自旋排列与取向显著区别于同构型化合物 CaFe₃O₅。 通过构建海森堡模型,我们发现这一现象源于 CuO₆八面体与 Fe₂O₅层之间的交换作用再分配:在压缩型 CuO₆八面体中,由于 Cu 的*d_{3z²-r²*}轨道特定取向,部分交换作用被选择性湮灭。本工作不仅提供了压缩 型 CuO₆八面体的独特范例,更揭示了其通过选择性湮灭交换作用可重构自旋结构并调控磁阻挫效应的 新机制。



图 1: CaCuFe2O5的自旋结构、轨道和磁相图。

关键词: 交换湮灭,磁阻挫,压缩 CuO₆八面体 参考文献

- 1. Cassidy, S. J.; Orlandi, F.; Manuel, P.; Clarke, S. J. Single phase charge ordered stoichiometric CaFe₃O₅ with commensurate and incommensurate trimeron ordering. *Nat. Commun.* **2019**, *10* (1), 5475.
- 2. Halcrow, M. A. Jahn–Teller distortions in transition metal compounds, and their importance in functional molecular and inorganic materials. *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42* (4), 1784-1795.
- 3. Balents, L. Spin liquids in frustrated magnets. *Nature* 2010, 464 (7286), 199-208.

高压下微观结构设计对热电材料性能的调控

孙海瑞、陈欣、张永胜、刘晓兵*

曲阜师范大学 物理工程学院/前沿交叉科学研究院

Email: hairuisun1216@qfnu.edu.cn

摘要:热电材料能够实现热能与电能的直接转换,其性能由热电优值(ZT=S²σT /κ)决定。如何协同 优化各参数之间的强耦合关系,是本领域的关键科学问题。本工作基于高温高压技术,通过微观结构设 计对单质 Te 基和 Ag₂Se 基热电材料的电输运和热输运性能进行了系统调控。(1)电输运性能优化方面: 在单质 Te 基材料内部成功构建 Te-黑磷异质结结构,有效优化了载流子输运行为,使电学性能稳步提 升;在 4.5 GPa 高压制备条件下,同步降低材料热导率,获得该体系当时最高 ZT 值 1.1。创新性地采用 高压技术,在单质 Te 基材料晶界处构建 Ag 导电通道,在提升载流子迁移率的同时,利用 Ag 颗粒作为 声子散射中心抑制了晶格热导率,最终将单质 Te 基材料的 ZT 值提升至 1.2。(2)热输运性能优化方面: 在 Ag₂Se 体系中,采用高温高压技术,创新性的利用有机物分解产物水,在 Ag₂Se 内部制备了不同尺 度的微观孔洞结构,使热导率显著降低至 0.52 W·m⁻¹·K⁻¹;同时,分解产生的碳化合物消除了晶界势垒, 维持了优异电输运性能;在 398 K 获得适用温区内最高 ZT 值 1.47,为热电器件的开发奠定材料基础。 实验结果表明,高温高压技术是调控热电材料微观结构的有效手段,通过异质结构筑、晶界工程和孔洞 结构设计等策略,可实现电学与热学性能的协同调控。本研究为热电材料性能优化提供了新的研究思路 和技术路径。



图 1 高温高压下热电材料的微观结构设计。(a) Te-黑磷异质结结构;(b) Ag 颗粒在晶界处的 mapping; (c) 碳化合物在样品中的微观形貌;(d) 不同尺度微观孔洞的电镜照片。 关键词:高温高压 微观结构 热导率 电阻率 热电优值

A、B 位同时有序的四重钙钛矿半金属 LaCu₃Ni₂Re₂O₁₂

一高压制备与物性研究

唐帅、刘哲宏、龙有文

中国科学院物理研究所 磁学国家重点实验室 Email: tangshuai@iphy.ac.cn

摘要:

磁性半金属(half metal)具有非常独特的电子能带结构,其中一种自旋取向(如下自旋)的电子能带穿 过费米面参与导电,形成金属特性;而另一种自旋取向(如上自旋)的电子能带在费米面处打开一个能隙, 不参与导电,呈现绝缘体或半导体特性.因而,理论上磁性半金属材料的传导电子具有 100%的自旋极 化率.正因为磁性半金属可以提供高度自旋极化的载流子,其被视为构建自旋电子器件的理想材料而备 受关注,在高密度磁存储、高灵敏度磁性传感器、节能设备、以及量子计算等领域具有广泛的应用前景. 而随着 *AB*O₃钙钛矿氧化物 La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃和双钙钛矿氧化物 Sr₂FeMoO₆半金属性的发现,高阶有序钙钛 矿氧化物由于其容纳多种磁性离子的灵活性和多样的晶体结构,为半金属磁体的探索提供了新的材料 平台.

近年来,半金属在四重钙钛矿体系中的研究也逐渐深入,一些具有优异性能的材料被陆续报导,如 首个高居里温度四钙钛矿半金属 CaCu₃Fe₂Re₂O₁₂, *B* 位近 100%有序的 LaCu₃Co₂Re₂O₁₂, Tc 高达 710 K 的 LaCu₃Fe₂Re₂O₁₂等.本工作着眼于 LaCu₃B₂Re₂O₁₂家族,探究 *B* 位为 Ni 时其磁电性质与半金属性,通过 高温高压的实验技术手段,合成了 *B* 位近 100%有序的四钙钛矿半金属 LaCu₃Ni₂Re₂O₁₂,同时进行了第 一性原理计算得到其能带结构与磁相互作用,以此完善对于 LaCu₃B₂Re₂O₁₂(B=Fe, Co, Ni)半金属四钙钛 矿家族的研究.

关键词: 高压制备, 钙钛矿氧化物, 半金属, 第一性原理计算 参考文献

- 1. Chen W, Seki H, et al. A half-metallic A-and B-site-ordered quadruple perovskite oxide CaCu3Fe2Re2O12 with large magnetization and a high transition temperature[J]. *Nature Communications*, 2014, 5(1): 3909.
- Liu Z, Sun Q, Ye X, et al. Quadruple perovskite oxide LaCu3Co2Re2O12: A ferrimagnetic half metal with nearly 100% B-site degree of order [J]. *Applied Physics Letters*: 2020, 117(15).
- 3. Liu Z, Zhang S, Wang X, et al. Realization of a half metal with a record-high Curie temperature in perovskite oxides[J]. *Advanced Materials*, 2022, 34(17): 2200626.

典型层状化合物在高温高压下的热电输运研究

王殿振、陶强*、朱品文*

吉林大学综合极端条件高压中心、高压与超硬材料全国重点实验室、物理学院 Email: <u>qiangtao@jlu.edu.cn</u>; zhupw@jlu.edu.cn

摘要:

热电转换依赖于电子和声子在材料内部的输运过程及其相互作用。高压通过压缩晶体结构,可以缩 短原子间距离,调控原子排列方式,改变电子云分布,诱导晶体结构相变和电子相变,从而调控电子和 声子的输运及其相互作用。因此,高压是优化材料热电输运性能的一种有效策略。

本工作基于本课题组自主设计的高温高压原位测量技术,以易压缩的典型层状化合物 MoS₂(X=S,Se,Te)为例,系统研究了层状材料在高温高压下的热电输运特性。研究表明:1、在层间耦合 作用最弱的P型MoS₂中,高压不仅能够减小层间距、增强层间耦合作用,而且构筑了大量层错,从而 调制载流子分布,导致MoS₂经历了P-N-P导电类型的连续转变,最终实现了电导率和塞贝克系数的协 同优化,使最优ZT值从1GPa时的0.012增大至5.5GPa时的0.191¹。2、在P型MoSe₂中,随着压力 的升高,电导率增加,而塞贝克系数减小,二者呈现出相互耦合的特征;随着温度的升高,由于在高压 下显著减小的带隙,导致了双极效应的发生,恶化了在高温时的塞贝克系数;通过掺杂注入额外的载流 子有效抑制了双极效应,从而显著提高功率因子²。3、在N型MoTe₂中,高压通过显著增强层间耦合 作用,同时诱导出带隙减小和能带收敛的双重效应,导致载流子浓度和态密度有效质量同时增大,有效 解耦了电导率和塞贝克系数,从而突破了功率因子的优化极限³。本工作系统研究了高压效应对热电输 运的影响,并探索了解耦热电输运的高压优化机制,为开发设计高性能的热电材料提供了指导意义。



图 1 高压对 2H-MoTe2 的热电输运解耦调控

关键词: 高温高压; 热电输运; MoS₂; MoSe₂; MoTe₂ 参考文献:

- 1. D. Z. Wang, J. Zou, et al. Appl. Phys. Lett. 2024, 125, 213903.
- 2. D. Z. Wang, C. You, et al. Appl. Phys. Lett. 2024, 125, 013903.
- 3. D. Z. Wang, M. Faizan, et al. Chin. Phys. Lett. 2025, 6.

B-C-N 晶体的制备与性能研究

<u>徐保银 ^{1,2}</u>、袁晓红 ^{1,2}、丰丙涛 ^{1,2}、姜懿峰 ^{1,2}、佘雅琪¹、丁战辉¹、潘 越^{1,2}、刘书成 ^{1,2}、胡阔 ^{1,2}、刘兆东 ^{1,2}、李全军 ^{1,2}、唐虎 ^{1,2}、刘冰冰 ^{1,2}

1. 吉林大学物理学院, 高压与超硬材料全国重点实验室

2. 吉林大学综合极端条件高压科学中心

Email: xuby24@mails.jlu.edu.cn

摘要:

近年来,随着材料科学向高性能、多功能化方向迈进,B-C-N(硼-碳-氮)三元化合物 因其独特的化学键合方式与可调控的物理化学特性,成为国际学术界和工业界的研究焦点。 B-C-N材料的研究不仅是对传统二元材料体系的突破,更承载着推动能源革命、电子技术升 级和可持续发展战略的重要使命。传统二元材料如石墨烯(C)和六方氮化硼(*h*-BN)虽各 具优势,但单一组分材料难以满足复杂场景需求。例如,石墨烯虽导电性优异,但带隙为零, 限制了其在半导体领域的应用;*h*-BN绝缘性和热稳定性突出,但导电性极差。B-C-N通过三 元元素的原子级杂化,可协同调控电导率、带隙、力学强度和耐腐蚀性,实现"导电-绝缘-耐高温"等多功能集成,为材料设计提供新思路。

在本研究中,我们设计开发了一种新的高压组装,并且使用溶剂法生长了毫米级 B-C-N 块体晶体。XPS、SEM-EDS、拉曼、STEM-EELS 和 APT 综合分析表明,合成的 B-C-N 晶体由分离的石墨烯和 *h*-BN 组成。与纯 *h*-BN 相比,B-C-N 晶体中的石墨可将带隙降至 4.5 eV (5.5 eV)。此外,B-C-N 晶体在可见光区域显示出明显的光电响应,光电流随压力而增加,在 14.5 GPa 时达到 381 nA 的最大值。我们还在石墨烯-*h*-BN 界面发现了类石墨结构的 B-C 相,与石墨烯组成了一个肖特基结,赋予了B-C-N 晶体整流行为。这项研究为设计具有特定功能的 B-C-N 混合材料提供了一种新方法,为推动电子和光电技术的发展提供了新机遇。

关键词:

硼碳氮;光电探测;高压高温合成;晶体

158

高压高温合成准一维半导体材料 TiSe₃

<u>于振海、</u>郭艳峰*

上海科技大学物质科学与技术学院 Email: guoyf@shanghaitech.edu.cn

摘要:

The transition metal trichalcogenides (TMTs) with quasi-one dimensional (Q-1D) crystal structure, are another noteworthy layered materials when compared with the well-studied transition metal dichalcogenides (TMDs). Herein, we successfully synthesized a new TMTs TiSe₃ single crystal, characterized by a filamentous shape, using high-pressure and high-temperature (HPHT) techniques. The TiSe₆ prisms share their tops and bottoms with each other, forming a 1D chain-like structure along the *b*-axis. TiSe₃ is identified as a narrow band gap semiconductor with electron-type carrier under ambient conditions. A pressure-induced semiconductor-to-metal transition was observed in TiSe₃ around 4 GPa. Notably, a pressure-induced Lifshitz transition occurred as the pressure further increasing to \sim 6 GPa, which is supported by the electrical transport, and high pressure crystal structure characterizations. Furthermore, the pressure-induced Lifshitz transition in TiSe₃ was also verified by electronic structures and Fermi surface calculations.



图 1,本文合成的 TiSe3 单晶样品的高压低温电阻表征。

关键词: 高压高温合成; 准一维材料; 电子相变 参考文献:

1. Zhenhai Yu, *et al.*, Pressure-induced metallization and Lifshitz transition in quasi-one-dimensional TiSe₃ single crystal, *Chinese Physics B* 2025, in press.

Shock synthesis of BiFeO₃ and its ferroelectric property

Fu-Ping Zhang^{a, *}, Hongliang He^a, Jin-mei Du^a, Yu-Sheng Liu^a,

Heng-Chang Nie^b

^a D&M center of equipment engineering, Institute of Fluid Physics, P.O. Box 919-102, Mianyang, Sichuan 621900, China ^bShanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China

Abstract

Shock synthesis of BiFeO₃ has been conducted by using explosively accelerated flyer plate which impacted the containers. Starting materials in containers were $Bi_2O_3+Fe_2O_3$ (stoichiometric ratio to form $BiFeO_3$) or $Bi_2O_3+2Fe_2O_3$ (stoichiometric ratio to form $Bi_2Fe_4O_9$) powder mixtures. The structures of the products were determined by X-ray diffraction (XRD). Results show that the yield of the BiFeO₃ phase increases with the increase in impact pressure. $Bi_2Fe_4O_9$ phase has not been observed and only the olivine phase has been observed when the starting material is $Bi_2O_3+Fe_2O_3$. Even if the starting material is $Bi_2O_3+Fe_2O_3$, the major phase is still BiFeO₃ and $Bi_{25}FeO_{40}$ phase. Strong chemo selectivity is observed at shock reaction system of $Bi_2O_3+Fe_2O_3$. BiFeO₃ ceramic also has been sintered from shock recovery powder, a very week ferroelectric behavior is observed at 750 °C. When the sintering temperature increased to 800 °C, an "inflated" polarization hysteresis loop occurred.

Keyword: BiFeO3, Shock synthesis, Ferroelectric

^{*} Author to whom correspondence should be addressed. Electronic mail:zfpttt@aliyun.com

新型 N₄链聚合氮结构的高压合成和常压截获

张慧敏*、张盈*、王元元、隋明宏、岳磊、刘爽、李全军、刘兆东、姚震*、王

鹏*、刘冰冰*

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室、物理学院 Email: hmzhang22@mails.jlu.edu.cn

摘要:

近年来,聚合氮及富氮化物因其作为高能量密度材料的巨大潜力而成为研究热点。然而,目前聚合 氮的合成压强依然比较高,超出了大腔体压机所能实现的压强范围(30 GPa),且大部分的聚合氮结构 不能截获到常压条件下,难以实现宏观量合成,因此限制了聚合氮材料的发展及应用。考虑到与质量较 小的离子相比,稀土金属离子会产生更强的化学预压缩效应,特别是含有f壳层电子的镧系金属在氢化 物的体系中已被证明在降低氢化物的合成压力方面起着重要的作用,因此我们在聚合氮的高压研究中引 入了金属铈与氮(N₂)反应,在约 25.3 GPa、2600 K 的条件下合成了具有 N₂单元和锯齿型 N₄链单元 的新型聚合氮结构 P-1 Ce₂N₆。此外,我们还注意到,在碱金属多氮化物的研究中,金属叠氮化物被用 作前驱体,导致产物的晶体结构和稳定性与使用金属作为前驱体时完全不同。因此,我们利用了氮化铈 与氮气进行高温高压实验,在约 21.4 GPa、3000 K 的条件下合成了同样具有 N₂单元和锯齿形 N₄链单 元 C2/m Ce₂N₆。特别的是,我们发现利用氮化铈作为前驱体合成的 C2/m Ce₂N₆能够截获至常压条件, 而利用金属铈作为前驱体合成的 P-1 Ce₂N₆在 3.8 GPa 以下的压力下发生了分解。理论计算表明,C2/m Ce₂N₆中较强的电荷转移作用、更高的配位数以及更高的热力学稳定性在 N₄链的常压截获中起到了至 关重要的作用。值得注意的是,本工作在较低压力条件下成功合成了可截获至常压环境的 Ce₂N₆材料, 有望利用大腔体压机技术实现该聚合氮材料的宏观量制备,从而为高含能聚合氮材料的实际应用提供重 要的途径。



图 1 高温高压制备 P-1 Ce₂N₆和 C2/m Ce₂N₆材料示意图。 关键词:聚合氮,含能材料,化学预压缩,电荷转移,常压截获

大体积高压设备在研制新型功能材料中的应用

张俊、望贤成、靳常青

中国科学院物理研究所 Email: zhang@iphy.ac.cn

摘要:

高压技术已经广泛应用于新材料的研制,特别是通过大体积压机高压高温合成技术,可将亚稳态的 新材料截获至常压条件,为其物性研究提供了可能。近期报告人运用大体积压机高压技术,成功制备了 系列新材料,研究了多元化的超晶胞结构及伴随的奇异物性,如磁电耦合等现象。这些详细研究,阐明 了材料的结构与物性之间的构效关系,揭示了新奇物性起源,对进一步设计新型功能材料具有重要启发 意义。



图 1 一维方向结构畸变演化

关键词: 高压高温、新材料、结构畸变、理论计算

参考文献:

- 1. Zhang J, Komarek A C, Jin M, et al. *Phys. Rev. Mater.* 5, 054606 (2021).
- 2. Zhang J, Wang X C, Zhou L, et al. *Adv. Mater.* 34, 2106728 (2022).
- 3. Zhang J, Zhang X Y, Xia Y H, et al. *Phys. Rev. B* 108, 174423 (2023).

高压下 N₂-O₂合金的拉曼光谱研究*

赵欣雨、刘静仪、陶雨、吴彬彬、常雪、雷力**

四川大学原子与分子物理研究所,成都 610065 **Email: lei@scu.edu.cn

近年来,高压诱导的物质电子结构重组、显著相态转变及新型晶体结构的发现,极大地拓展了凝聚 态物理与材料化学的研究边界。氮气(N₂)和氧气(O₂)作为地球大气中占比高达 99% 的双原子分子 体系,其在高压下的行为研究不仅关乎对地球内部物质组成与演化的理解,更对探索新型高压合成材料、 揭示极端天体物理条件下物质特性具有重要意义。

研究发现,随着压力逐步升高,体系拉曼光谱特征峰呈现红移,蓝移等复杂变化,同时伴随峰强改 变与峰形展宽。光谱特征的多维度变化与 N2-O2体系相态从气态向流体、固态的转变紧密相关,也清晰 反映出分子间相互作用的动态演变过程,以及分子振动模式与聚集态结构的显著调整。

本研究为揭示室温高压下 N2-O2体系的微观作用机制积累了关键实验数据,有助于深化对高压下物质行为的理解,对丰富高压物理化学理论体系具有重要意义,也为类似金属氢等高压物质研究方向提供了新的思路与参考。



图 1 N2 - O2 合金在金刚石对顶砧中 9GPa 的光学照片及其拉曼光谱

关键词: 高压, 拉曼光谱, N₂-O₂合金 参考文献

- 1. Baer, Bruce J., and Malcolm Nicol., et al. The Journal of Physical Chemistry 93.5 (1989): 1683-1687.
- 2. Sihachakr D, Loubeyre P., et al. Physical Review B, 2004, 70(13): 134105.
- 3. L. Lei*, et al, Chinese Physics Letters, 2020, 37, 068101.

^{*}基金项目:国家自然科学基金(NO.12374013),中央高校基本科研业务费专项资金(2020SCUNL107)

^{**}通讯作者: 雷力, 男, 四川大学研究员, 博士生导师, 主要从事高压物理学研究, Email: lei@scu.edu.cn

高压下层状三卤化物的合成与表征

周密

物质模拟方法与软件教育部重点实验室,物理学院,吉林大学 石墨烯的发现引燃了物理、化学和材料科学等领域对二维材料的跨学科研究。二维材料 家族不断的成长壮大,包括石墨烯、黑磷、过渡金属二硫化物、金属有机配合物等。在 2017 年,科学家成功制备了具有本征铁磁性的二维材料 Crl₃[1],这是二维铁磁材料取得的标志 性进展之一,同时也开启了学界对二维卤化物的研究热潮。V 族三卤化物具有与金属三卤化 物相同的化学计量比,却存在不同的结构(分子晶体),其电子被限制在分子内,严重制约 了它们在器件材料方面的应用。如果通过改变温压环境将 V 族三卤化物转化为二维层状材 料,那么将拓展二维层状卤化物材料的研究空间。为此,我们对 PBr₃和 SbBr₃行了系统的 高压研究,通过分析 PBr₃的原位高压拉曼和 X 射线衍射实验,发现 PBr₃在 0.7 GPa 条件下 结晶为正交结构的分子相(空间群 *Pnma*),并且在 44 GPa 内没有相变发生。然而当在 27.0 GPa 条件下激光加热至~1800 K,发现 PBr₃转变为具有准六配位结构的二维层状材料(空 间群 *P2*1/*c*),同时卸压实验发现该二维材料可以稳定至 1.5 GPa[2]。采用相同的实验方法, 我们发现 SbBr₃在 7.6 GPa 条件下由常压相(空间群 *Pbnm*)转变为具有八配位结构的二维 层状材料(空间群 *P2*1/*a*)[3]。本研究不仅加深了对 PBr₃和 SbBr₃ 相图的认识,而且拓展了 在分子相三卤化物中寻找二维层状功能材料的研究空间。

参考文献:

[1]. B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla, D. Klein, R. Cheng, K. Seyler, D. Zhong, E. Schmidgall, M. McGuire, D. Cobden, W. Yao, D. Xiao, P. Jarillo-Herrero, X. Xu. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. Nature 546, 270–273 (2017).

[2]. J. Cai, S. Liu, W. Lu, Y. Ji, K. Hao, X. Zhao, P. Ning, G. Liu, H. Wang, and M. Zhou, Discovery of quasi-six-coordinated layered phase of PBr₃ at high temperature and pressure, Phys. Rev. Research 5, 033164 (2023)

[3]. J. Cai, X. Zhao, Y. Hao, W. Lu, G. Liu, H. Wang, and M. Zhou, Discovery of eight-coordinated layered phase of SbBr₃ under high pressure, Appl. Phys. Lett 124, 112101(2024)

¹通讯联系人: 周密。电话: 13894805340; E-mail address: mzhou@jlu.edu.cn

极端高压下的纳米碳材料研究

陈亚彬

北京理工大学 前沿交叉科学院 Email: chyb0422@bit.edu.cn

摘要:

压力是独立于温度和化学组分的第三个热力学参量。在极端压力下,低维纳米材料能够展现出丰富的结构转化路径,并表现出诸多新奇的物理性能。报告人将首先结合课题组情况简要概述极端环境科学;其次重点介绍极端高压下纳米碳材料的结构转变及物性研究,主要包括:1)高压条件下单壁碳纳米管的结构变化及力学模量研究。基于共振拉曼光谱,测试了高压力不同手性单壁碳纳米管的光谱性质,分析了高压下单壁碳纳米管的压致形变路径,阐述了单壁碳纳米管径向模量的手性依赖性;2)高温高 压条件下纳米碳前驱体相变过程中的维度效应研究。通过比较零维碳纳米笼(CNCs)和一维碳纳米管 (CNTs)两种不同维度的前驱物,发现了纳米碳材料合成金刚石过程中的维度效应其及高温高压下的 物理机制,这有别于传统石墨至金刚石的转变过程。零维 CNCs和一维 CNTs首先经过结构坍塌和石墨 化,然后再形成具有内嵌金刚石簇和无定形碳的混合物,最终形成立方金刚石;3)超薄二维金刚石的 可控制备及转变机理等采用激光加热高温高压技术,实现了从石墨烯前驱物到二维金刚石的可控转变, 该二维金刚石具有可控的厚度和优异的物理性能。截获到常温常压条件下的二金刚石表现出尖锐的 *T*2g 拉曼模式(线宽~3.6 cm⁻¹),以及 SiV·和 NV₀等色心的超强光致发光。极端材料化学研究有望为传统理 工学科注入新的生命力,并在解决我国卡脖子科技难题中发挥重要作用。

165
Controlled Synthesis of Two-dimensional Diamond under Extreme Conditions

Jiayin Li^{1,2}, Yabin Chen^{1,2,*}

¹School of Chemistry and Chemical Engineering
 ²School of Interdisciplinary Science, BIT
 Beijing Institute of Technology, Beijing 100081
 *Email: chyb0422@bit.edu.cn

Abstract: Diamond and its derivates have attracted considerable attention due to their outstanding hardness, thermal conductivity and chemical inertness, but its inherent toughness and electrical conductivity are inferior to that of many counterparts, which limit the application situation. Various strategies, such as structural modulation and constructing diamond-based composites have been developed to enhance its mechanical and electrical properties. Thickness, as a novel degree of freedom, is rarely considered to regulate the diamond structure and further extend its applications. Two-dimensional (2D) diamond is found to inherit the superior properties from bulk diamond, and exhibit thickness-dependent properties. However, significant challenges have still remained with regards to the synthesis, structure and intrinsic properties exploration of 2D diamond. Herein, we have investigated the synthesis of ultrathin diamond films with controlled thickness, realized by laser-heating few-layer graphene (FLG) in diamond anvil cell. The morphology of 2D diamond on Re surface well consistent with initial FLG and remained observable even quenched to ambient condition from high pressure and high temperature. The quenched 2D diamond exhibits evident Raman T_{2g} mode at 1324 ~ 1346 cm⁻¹, which are uniquely originated from the lattice structure of sp^3 carbon. In addition, the sp^3 concentration and atomic structure of 2D diamond were systematically investigated by X-ray photoelectron spectroscopy, auger electron spectroscopy and high-resolution transmission electron microscope. We believe our results can shed light on the structural design and preparation of many novel carbon allotropes.

Key words: Two-dimensional diamond; Few-layer graphene; High pressure; High temperature; Phase transition

References

[1] Jiayin Li, Guoshuai Du, Lili Zhao, Wuxiao Han, Jiaxin Ming, Shang Chen, Pengcheng Zhao, Lu Bai, Jiaohui Yan, Yubing Du, Jiajia Feng, Hongliang Dong, Ke Jin, Weigao Xu, Bin Chen, Jianguo Zhang^{*}, Yabin Chen^{*}. Experimental Demonstration and Transformation Mechanism of Quenchable Two-Dimensional Diamane[J]. Nature Communications, 2025. (under review)
[2] Jiaxin Ming, Jingyi Tian, Liming Zhao, Jiayin Li, Guoshuai Du, Lixing Kang, Zheng Hu^{*}, Yabin Chen^{*}. Dimension Effect of Nanocarbon Precursors on Diamond Synthesis and Transformation Mechanism under Extreme Conditions[J]. Nano Letters, 2025. (under review)

高压合成具有极化结构的氮化物钙钛矿 CeTaN₃ 及其铁电性能研究

宋国柱、郑祥亮、姚晓东、鲍威、郭尔嘉、王善民

南方科技大学物理系,香港城市大学物理系 Email: 12150119@mail.sustech.edu.cn

摘要: 开发具有强极化特性的无氧铁电材料体系,在基础研究与工程应用层面均具有非常重要的价值。这类材料不仅能有效规避传统氧化物铁电体(如 Pb(Zr,Ti)O₃)含毒害元素、界面 兼容性差等固有缺陷,更在非易失性存储器等关键器件领域展现独特优势。现有铁电材料主 要局限于氧化物与卤化物两大类,而兼具理论预测铁电特性与优异物性的钙钛矿型三元氮化 物体系有望突破这一材料格局,被视为新一代先进铁电材料的理想候选体系,在多功能器件 开发中展现出广阔前景。然而受限于常压合成技术瓶颈,此类氮化物铁电体尚未获得实验验 证。本研究通过高压合成技术成功制备出氮缺陷型铈钽氮化物(CeTaN₃₋₆),成功解析其具 有正交 *Pmn*2₁极性空间群结构,化学组分为 CeTaN₂₆₈。该材料呈现典型电绝缘特性并具备 可逆电极化响应,其极化强度高达 20.5 μC/cm²,同时具备~3 kV/cm 的矫顽场,这是迄今为 止首次在氮化物体系中观测到本征铁电性。特别值得关注的是,该材料的极化态可稳定维持 至 1373 K,具有极强的热力学稳定性并兼具卓越机械强度与化学稳定性等综合性能优势, 不仅为实用化铁电器件开发提供了理想平台,更为探索凝聚态体系中的新型量子态研究开辟 了新路径。

关键词:氮化物钙钛矿,高压合成,铁电

参考文献

- 1. X. Hong, Nitride perovskite becomes polar, Science 374, 1445 (2021).
- 2. K. R. Talley, C. L. Perkins, D. R. Diercks, G. L. Brennecka, and A. Zakutayev, Synthesis of LaWN₃ nitride perovskite with polar symmetry, Science **374**, 1488 (2021).
- A. L. Greenaway, C. L. Melamed, M. B. Tellekamp, R. Woods-Robinson, E. S. Toberer, J. R. Neilson, and A. C. Tamboli, Ternary nitride materials: fundamentals and emerging device applications, Annu. Rev. Mater. Res. 51, 591 (2021).
- 4. J. F. Scott, Applications of modern ferroelectrics, Science 315, 954 (2007).

Interfacial Bonding of Diamond/BN heterostructure Under Extreme

Conditions

Lu Bai^{1,2}, Yabin Chen^{1,2,*}

¹School of Chemistry and Chemical Engineering
 ²School of Interdisciplinary Science, BIT
 Beijing Institute of Technology, Beijing 100081
 *Email: chyb0422@bit.edu.cn

Abstract:

Heterostructures fabricated by stacking van der Waals (vdW) materials can combine the unique properties of individual materials and even introduce many intriguing characteristics. Diamond is a material with promising electronics applications but with challenges in effective doping. Boron nitride (BN), due to its similar lattice structure, is ideal for forming heterostructure with diamond to modify electronic properties and especially shift the band positions. Moreover, the diamond/BN interface theoretically enables modulation doping in diamond, thus mitigating the difficulties in achieving effective doping in diamond. However, significant challenges still remain with regard to the synthesis, interface structure and intrinsic properties exploration of diamond/BN heterostructures. Here, we have successfully synthesized diamond/BN heterostructure under high pressure and high temperature (HPHT) using few-nanometer-thick graphene/hexagonal boron nitride (G/hBN) as precursor. Raman results indicate that G/hBN films undergo a significant change in hybridization from sp^2 to sp^3 under high temperature and high pressure, forming diamond/BN heterostructure. The morphology of diamond/BN heterostructure is investigated by scanning electron microscope and atomic force microscopy. In addition, the atom arrangement at the interface has been studied by high-resolution transmission electron microscope in detail. Our results pave the way to realize direct transition from interlayer van-der-Waals interactions to covalent bonds and shed light on diamond doping by forming heterostructures with other suitable materials.



Figure 1. Schematic diagram of interfacial bonding of diamond/BN heterostructure Key words: diamond/BN heterostructure; Interfacial bonding; Diamond doping; HPHT

高温高压下 SnS 的高热电性能

高语崎、王星淋、由存、王殿振、高楠、贾琪、李志慧、陶强*、朱品文* 吉林大学,高压与超硬材料全国重点实验室,综合极端条件高压科学中心,物理学院 Email: gaoyq24@mails.jlu.edu.cn, qiangtao@jlu.edu.cn, zhupw@jlu.edu.cn

摘要:

开发低成本、环保的热电材料至关重要。硫化锡(Sn)凭借其储量丰富、无毒、价格低廉的原料 锡和硫元素等优点,是兼备经济效益的新型环境友好型热电材料。由于其独特的层状晶体结构特性, SnS 表现出强非谐振效应,从而导致其固有的低热导率。因此,SnS 表现出成为高性能热电材料的优势 和潜力^[1-2]。SnS 属于宽带隙热电材料,其带隙为 1.013 eV,其固有的低载流子浓度导致其电导率较低。 SnS 的热导率相对较低。因此,优化其电导率是提高其 ZT 值的关键。材料的热电性能对晶格振动、电 子结构和原子间相互作用等是非常敏感的。高压作为一种非化学方法,可以调节整个能带结构,在优化 热电性能方面显示出独特的应用潜力。作为一种层状宽带隙热电材料,SnS 有望通过高压有效地调节宽 带隙的电子结构,从而大幅提高 SnS 的电导率。结合 SnS 固有的超低热导率,高压下电学性能的优化 可以极大地提高 SnS 的热电性能。

本工作,通过原位测量高温高压下的热电输运特性来研究 SnS 高温高压下的热电性能。结果表明,利用高压调节电子结构,调解电子和声子输运冲突,优化热电性能。相比常压,SnS 的电导率提升了 2 个数量级。虽然 SnS 在高压下赛贝克系数略有下降,但在 5GPa, 652 K 时,功率因子增加到 1436 µWm⁻¹K⁻²。结合 SnS 固有的低导热系数,SnS 在 5 GPa, 652 K 时的 ZT 最大值为 0.77。高压下 SnS 的 ZT 值与常压下 SnS 掺杂的 ZT 值相当。这项工作证明了高压可以有效地优化热电材料的热电性能,为未来优化高性能热电材料提供了新的思路。



图 1 (a) 不同压力下 SnS 的 ZT 值, (b) 与先前报道的 p 型 SnS 多晶热电材料 ZT 值的比较。 关键词: SnS, 热电材料, 高温高压 参考文献

^{1.} Parker D and Singh D J 2010 J. Appl. Phys. 108 083712

^{2.} Tan Q and Li J F 2014 J. Electron. Mater. 43 2435

高压锻造烧结制备高性能 TiB2 陶瓷

霍浪浪,刘兵,陈世龙,赵智胜

燕山大学材料科学与工程学院 Email: m18830392977@163.com

摘要:

TiB₂ 作为超高温陶瓷的典型代表,因其高熔点、优异导电导热性及卓越耐磨性备受关注^[1-4]。这些 优异性能使其成为航空航天及军工等严苛环境下的理想候选材料^[5]。然而,TiB₂ 的高共价键特性与低 自扩散系数导致在使用传统烧结工艺时需在约 2000 ℃ 及以上高温环境中进行长时间保温,才能获得 高致密度的样品。但极端烧结条件易引发晶粒异常生长,导致材料韧性下降、脆性增加。本研究通过整 合高压烧结与锻造烧结技术,成功实现了 TiB₂ 陶瓷在较低温度 (1650℃)下的完全致密化。高压锻造 烧结技术通过强化颗粒重排与塑性变形机制,使 TiB₂ 陶瓷的致密化温度较传统高压烧结工艺降低约 200 ℃。经高压锻造烧结技术制备的 TiB₂ 陶瓷样品具有更精细的微观结构和更优异的力学性能,其纳 米压痕硬度达到 30.8 GPa,弯曲强度为 586 MPa。本研究证实高压锻造烧结技术可实现 TiB₂ 陶瓷的 高效致密化,为超高温陶瓷制备提供了新方法。

关键词: TiB2; 高压锻造烧结; 致密化; 力学性能

参考文献

- A. Mukhopadhyay, G.B. Raju, B. Basu, A.K. Suri, Correlation between phase evolution, mechanical properties and instrumented indentation response of TiB₂-based ceramics, J. Eur. Ceram. Soc. 29 (2009) 505–516, <u>https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2008.06.030</u>.
- B. Liu, W. Wei, Y. Gan, C. Duan, H. Cui, Preparation, mechanical properties and microstructure of TiB₂ based ceramic cutting tool material toughened by TiC whisker, Int. J. Refract. Met. Hard Mater. 93 (2020) 105372, https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2020.105372.
- A. Kapylou, V. Urbanovich, V. Kukareko, High pressure sintering of TiB₂ ceramics at different temperatures, Process. Appl. Ceram. 2 (2008) 9–12, <u>https://doi.org/10.2298/pac0801009k</u>.
- 4. Y. Li, J. Zou, Q. Zhu, W. Guo, W. Wang, W. Ji, Z. Fu, Microstructure characterization of high-pressure induced texture in fully densified zirconium diboride ceramics, J. Am. Ceram. Soc. 106 (2023) 39–45, https://doi.org/10.1111/jace.18784.
- L. Feng, W.G. Fahrenholtz, G.E. Hilmas, L. Silvestroni, Superhard single-phase (Ti, Cr)B2 ceramics, J. Am. Ceram. Soc. 105 (2022) 5032–5038, <u>https://doi.org/10.1111/jace.18490</u>.

新型非晶碳-金刚石复合材料的合成与表征

李晨明、李朋朋、祁墨达、胡文涛、田永君、Alexander V. Soldatov

燕山大学高压科学中心亚稳材料国家重点实验室材料学院 Email: lcm-@stumail.ysu.edu.cn

摘要:

我们以富勒烯 C₆₀为前驱体,在高压(25 GPa)、高温条件下成功合成了非晶碳 - 纳米晶金刚石复合材料。我们分别借助高分辨透射电子显微镜(HRTEM)、同步辐射 X 射线衍射(XRD)以及拉曼光谱技术,对该复合材料的结构特征和振动特性展开了深入研究。通过多种硬度测试方法对样品硬度进行表征,各方法所得结果相互印证、高度一致:此类复合材料展现出极为优异的力学性能,其硬度甚至超越了单晶金刚石。我们进一步探讨了该复合材料的形成机制、剖析了其卓越力学性能的内在成因,同时对复合材料的合成工艺参数进行了优化探索。

关键词: 高温高压 非晶碳 纳米金刚石 复合材料

参考文献:

- Zhang, S. et al. Discovery of carbon-based strongest and hardest amorphous material. National Science Review 9. doi:10.1093/nsr/nwab140 (2022).
- 2. Li, Z. et al. Ultrastrong conductive in situ composite composed of nanodiamond incoherently embedded in disordered multilayer graphene. Nature Materials 22, 42-49, doi:10.1038/s41563-022-01425-9 (2022)
- Shang, Y. et al. Ultrahard bulk amorphous carbon from collapsed fullerene. Nature 599, 599-604, doi:10.1038/s41586-021-03882-9 (2021).

高压快速制备立方 GeSe 基热电材料

<u>李航</u>、徐波

燕山大学,材料科学与工程学院,高压科学研究中心 hangli@stumail.ysu.edu.cn

摘要:

近年来,能够对余热回收利用的热电转化技术得到快速发展。不同类型热电材料有不同的最优工作 温度区间,GeSe基热电材料的研究取得显著进展由于其在中温区的优异性能和应用潜力。原始斜方 GeSe材料(空间群:Pnma)在室温至 500 ℃温度区间热电性能较差(ZT<0.2)。因此,我们通过相结 构转变策略、微结构工程和微量掺杂三种方式去提高 GeSe 基热电材料的热电性能和机械性能。通过 Sb 原子取代 Ge 原子、Te 原子取代 Se 原子,我们成功实现立方基(GeSe)0.9(Sb2Te3)0.1材料(空间群:Fm-3m) 的制备。在此之上,高压合成引入了大量的缺陷和畴结构,微量元素掺杂调节材料内部载流子迁移率和 载流子浓度;多晶 Ge0.895Mn0.005Se0.9(Sb2Te3)0.1材料维氏硬度达到 1.95 GPa,抗折强度达到 98 MPa,抗 压强度达到 282 MPa。在机械性能提高的同时,材料的热电性能大幅提高,ZT 值达到 1.13 (500 ℃), 晶格热导率低至 0.54 W/mK。我们的工作通过相结构转变策略和微结构工程为同时提高材料机械性能和 热电性能提供了一个范例,对 GeSe 基热电材料的未来应用提供了重要基础。



图 1 (a) (GeSe)1-y(Sb2Te3)y材料 X 射线衍射图谱。(b) (GeSe)1-y(Sb2Te3)y材料 ZT 值

关键词: 高压合成, 相变, GeSe, 热电材料, 机械性能。 参考文献

- [1] Bo Xu, et al. Breaking a bottleneck for thermoelectric generators. Science. 2023, 382(6673): 882-883.
- [2] Riddhimoy Pathak, et al. Vacancy controlled nanoscale cation ordering leads to high thermoelectric performance. Energy & Environmental Science. 2023, 16(7): 3110-3118.
- [3] Jingfeng Dong, et al. High Thermoelectric Performance in Rhombohedral GeSe-LiBiTe₂. Journal of the American Chemical Society. 2024,146,25.

晶界工程调控超硬纳米聚晶金刚石的合成

<u>李相君 1,</u>#, 姚明光 1,*

1吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室,中国长春,130012

*Email: yaomg@jlu.edu.cn

摘要:纳米聚晶金刚石(NPD)有着与单晶金刚石(SCD)比肩的硬度和优于 SCD 的断裂韧性, 结合无解理面的特性也使其综合性能优于传统的聚晶及 SCD。对于纳米晶来说,合理设计调控晶界 结构是提高 NPD 机械性能的重要手段,而纳米晶的晶界效应十分复杂,晶界处的纳米结构设计也一 直是该领域的一大难题。我们通过在前驱体中添加还原氧化石墨烯(rGO)充当 NPD 的"粘结剂" 实现样品制备。rGO 良好的层间滑移特性使得 NPD 在高温高压烧结时晶粒得以滑移偏转,因应力集 中导致的晶粒细化区域减少,同时减少了三角晶界(tri-GB)区域的产生。超薄石墨烯在高温高压下 与晶粒良好烧结形成更多共格晶界,形成强共价连接,通过共格晶界形成连续的位错阻挡网络,大 幅提高了 NPD 样品的机械性能。

关键词: 超硬材料; 纳米聚晶金刚石; 晶界工程

大尺寸超硬非晶碳的合成

李旭、尚宇琛、姚明光

吉林大学物理学院 Email: yaomg@jlu.edu.cn

摘要:

非晶态碳材料随着其内部 sp3 杂化碳含量的提升展现出极其优异的物理性质,吸引了研究者广泛的 关注。近期,我们在 27GPa 附近首次通过 C₆₀ 合成出毫米级近全 sp3 非晶碳块体,该材料具备非晶中最 高的硬度、模量和热导率,在超精密加工、光学元件等领域有广阔应用前景。但较高的合成压力严重限 制了其应用,我们基于 Walker 型大腔体压机,通过对组装的改进和优化,在小于 18GPa 的压力下合成 了高质量的超硬非晶碳块材,其直径在 2.5mm 以上,初步实现了超硬非晶碳的大尺寸制备。



图 1 非晶碳块体样品的光学照片及尺寸

关键词: 非晶碳 大尺寸合成 超硬材料 高压实验技术 参考文献

1. Shang, Y. C. et al. Ultrahard bulk amorphous carbon from collapsed fullerene. Nature 599,599-604 (2021).

基于亲铁性的 5d 贵金属氮化物高压合成方法

<u>刘德璞</u>、陶雨、吴彬彬、刘静仪、周春银、房雷鸣、李昊、李林、贾

旭、张恒源、贺端威、雷力*

四川大学 原子与分子物理研究所 Email: lei@scu.edu.cn

摘要:

5d 贵金属(Os、Ir、Pt、Au)因 5d 轨道高电子填充率及相对论效应引发轨道收缩,与 氮气分子(N₂)的 946 kJ/mol 氮氮三键共同构成双重惰性体系。这种固有惰性导致其氮化物 合成长期受热力学限制,使得此类化合物潜在的物性至今未能被系统探索,形成基础研究与 应用开发的关键断层。目前,在极端压力条件下通过激光加热金刚石压砧技术成功实现了常 规方法难以合成的 PtN₂、OsN₂、IrN₂。但受限于产物尺寸仅为微米级,难以满足更广泛的物 性表征,且 Au-N 体系至今尚无高压合成报道。因此亟需探索新型合成策略,一方面突破样 品体积对物性表征的制约,另一方面通过突破传统路径以截获亚稳态新材料。

近期,我们基于 Pt 和 Au 高亲铁性特性,设计了一种新型高压偶联(high-pressure coupling, HPC)反应。以铁(Fe)为媒介,在大腔体压机可达的压力与温度条件下,成功制备出毫米级三元 M-Fe-N (M=Pt、Au)球形块体材料。通过中子粉末衍射、高压同步辐射 X 射线衍射等技术解析了该三元氮化物的结构特征。在此基础上,我们进一步针对 Au-Fe-N 体系开展了磁性及力学性能的表征。同步辐射 X 射线成像技术与 LVP 的结合,为合成过程的直观解析提供了优异探针。基于该技术,我们观测到 Au-Fe-N 材料的形成过程,首次实现了极端高压条件下 HPC 合成动态路径机制的直观可视化。

关键词: 5d 贵金属氮化物, 高压化学合成, 中子粉末衍射、同步辐射 X 射线成像

参考文献(中文小五号宋体,其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- 1. H. Zhang, B. Wu, J. Liu, Z. et al., Inorg. Chem, 2023, 62, 16, 6263.
- 2. L. Lei*, W. Yin, et al., Inorg. Chem, 2013, 52,13356-13362.
- 3. Yang, Ke, et al., Nuclear Science and Techniques. 35.6 (2024): 98.
- 4. Gregoryanz, et al., Nature materials. 3(5), 294-297.

Carbon Vacancy Induced Metallicity and Lattice Distortion for Superior Mechanical Properties in Niobium Carbide

Yuyue Pang, Wang Chen, Weiwei Dong, Shuailing Ma, Min Lian, Hao Song,

Mingyang Du, Xingbin Zhao, Jiarong Cheng, Songpeng Zhang, Bao Yuan,

Xiaodong Li, Tian Cui

宁波大学物理科学与技术学院 Email: Pangyy001@163.com

摘要:

Niobium carbide (NbC) has been considered as one of the most significant carbides due to the high hardness and thermal stability, although it usually exhibits low fracture toughness. Thus, to improve the toughness without hardness deterioration is one of the most challenging issues in material science. In present work, non-stoichiometric NbC_x ($0.6 \le x \le 1$) with controlled carbon vacancies was synthesized under high pressure (5 GPa) and high temperature (2200 °C) conditions trying to enhance the mechanical properties of NbC_x by refined microstructures. The effects of carbon vacancies on the mechanical properties and superconductivity of NbC_x were systematically investigated.



图 1 XRD patterns of NbC_x powders sintered and rietveld refinement results

关键词: Niobium carbide, Nonstoichiometric, Hardness, Fracture toughness, High temperature and high pressure

1. Chen, W., Dong, W., Ma, S., Lian, M., Zhao, X., Cheng, J., Zhang, S., Yuan, B., Li, X., and Cui, T. (2024). Carbon Vacancy Induced Metallicity and Lattice Distortion for Superior Mechanical Properties in Niobium Carbide. Preprint at SSRN, https://doi.org/10.2139/ssrn.5018132

高压合成 GeTe 热电材料及其物性研究

沈涛、王滨浩、赵海东、王丹, 陈晨, 徐波

燕山大学亚稳材料科学与制备技术国家重点实验室,高压科学中心(CHiPS),秦皇岛 066004

Email: shentao4019@126.com

摘要:

GeTe 作为一种典型的中温区热电材料,因其优异的热电性能与环境友好特性,近年来受到广 泛关注。传统合成方法如熔融法、机械合金化等虽已实现一定性能优化,但其在合成效率与材 料调控方面存在局限。本研究采用高压合成技术制备 P 型 GeTe 热电材料,在较低温度和更短 时间内成功合成出致密结构样品。通过 XRD 和 SEM 等结构与形貌表征,发现样品具备良好的菱 形 R3m 相结构,断口存在显著的铁电筹结构,有效增强了声子散射,降低了晶格热导率。性能 测试表明,高压合成样品的热电优值(ZT)达到与传统熔融淬火法相近的水平,且具备更绿色、 高效的合成优势。该研究展示了高压工艺在提升 GeTe 热电性能方面的巨大潜力,并为后续实 现多策略协同调控(如纳米结构工程、能带工程、对称性调控)奠定基础。

图 1 高压合成 GeTe 样品的 XRD 图谱与 SEM 表征

关键词: 高压合成; GeTe; 热电材料; 晶格热导率; 结构调控

参考文献

- [1] Pei Y, et al. Nature, 2011, 473(7345): 66-69.
- [2] Zhang Q, et al. Advanced Materials, 2017, 29(14): 1605880.
- [3] Liu W, et al. Energy Environ. Sci., 2015, 8: 706-713.

镧系金属三氢化物高压相的截获

施柯羽、李英健、朱品文、付钰豪*、李鑫*

吉林大学 综合极端高压科学中心 Email: shiky23@jlu.edu.cn 、xin_li@jlu.edu.cn

摘要:

近年来,氢化物在高温超导领域引发了广泛关注。然而,如何在常压条件下稳定其高压相,始终是该领域面临的巨大挑战。本文介绍了一种创新合成方法,借助大腔体压机(LVP)的高压高温(HPHT)技术,成功实现了亚稳态高压相在常压下的稳定。利用这一方法,我们成功将七个面心立方(fcc)结构的LnH3氢化物(Ln=Sm、Gd、Tb、Dy、Ho、Er和Tm)的高压相保留至常压状态。考虑温度与非谐效应的晶格动力学计算结果显示,这些fcc-LnH3氢化物在常压下具有良好的稳定性。磁学测量表明,fcc-LnH3呈现出顺磁性。本研究成果为氢化物高压相的稳定化提供了可靠路径,也为新型超导材料的研发奠定了重要基础。

关键词:金属氢化物、高温高压法、截获

Effect of High Pressure on the Ferroelectric Properties of New Multiferroic Materials

Song Chunrui¹, Liedienov N.A.^{1,2}, Li Quanjun¹, Pashchenko A.V.^{1,2}

 ¹ State Key Laboratory of Superhard Materials, Jilin University
 ² Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, NAS of Ukraine Email: songcr24@mails.jlu.edu.cn; liedienov@jlu.com; liquanjun@jlu.edu.cn; alpash@ukr.net

Abstract: As an excellent multifunctional material, multiferroic one integrates various properties such as ferroelectric, ferromagnetic, and/or ferroelastic, and is expected to bring far-reaching changes to modern science and technology. We obtained the new multiferroic 0.8MZFO-0.2BLFO (M8B2) composite by mixing the ferromagnetic $Mn_{0.6}Zn_{0.3}Fe_{2.1}O_4$ (MZFO) and multiferroic perovskite $Bi_{0.9}La_{0.1}FeO_3$ (BLFO) nanopowders at a weight ratio of 8:2 and pressing them using high-pressure torsion method (5 GPa and N = 5). According to the Fig. 1, at ambient pressure (0 GPa), the residual polarization of the hysteresis loop exhibits a voltage-dependent increase from 0.0264 to 0.1128 μ C/cm². As the pressure increases to 2 GPa, the ferroelectric residual polarization (P_r) rises significantly, likely due to enhanced lattice distortion under compression, which strengthens ferroelectricity [1]. However, the hysteresis area of the composite multiferroic material also expands, indicating increased leakage loss [2]. To 4.85 GPa, this effect becomes more pronounced, suggesting greater energy dissipation. The results demonstrate that pressure can drive ferroelectric materials toward metallization, offering valuable insights for multiferroic research.



Figure 1. Field dependences of polarization for the M8B2 under high pressure at a frequency of 1000 Hz.

Keywords: multiferroics, ferroelectricity, residual polarization, nanocomposite, high pressure torsion method References:

- 1. Minh D. Nguyen. Ultrahigh energy-storage performance in lead-free BZT thin-films by tuning relaxor behavior [J] Materials Research Bulletin.2021,133,111072.
- 2. Soheli, S.N. Lead-Free NaNbO3-Based Ceramics for Electrostatic Energy Storage Capacitors [J] Ceramics. 2024, 7, 712-734.

高压高温合成富硼 VB₂复合材料的断裂韧性提升

宋德鑫、潘益龙*、崔田

高压物理科学研究院,物理科学与技术学院,宁波大学 Email: <u>panyilong@nbu.edu.cn</u>

过渡金属硼化物因其优异的高硬度特性被视为有前景的超硬材料,但其脆性断裂问题限制了实际应用。近年来,富硼化物的研究进展表明,提高硼含量可获得超硬相^[1](如 MoB₅,其理论硬度约为 37–39 GPa^[2]),但在保持韧性方面仍面临挑战。本研究旨在通过在极端条件下合成富硼的二硼化钒(VB₂)来探索硬度与韧性之间的权衡。实验采用硼粉与 VB₂粉末按不同摩尔比混合,在 15 GPa、1000–1900℃条件下进行反应。XRD 分析表明主物相仍为 VB₂。然而,在部分温度条件下烧结的样品,其断裂韧性高达 9 MPa·m^{0.5},显著优于化学计量比为1:1 的 VB₂样品,表现出优异的抗裂性能。该性能提升可能归因于富硼环境与高压合成诱导的微观结构优化或缺陷结构的引入,从而有效阻碍裂纹扩展。本研究展示了一种实现兼具高硬度与高韧性硼化物的新路径,为设计新一代超硬复合材料并在高压下稳定富硼结构提供了有益启示。

关键词: 过渡金属硼化物; 高温高压; 超硬材料; 断裂韧性

[1] Yang, H.; Sun, H.; Chen, C. F. Is osmium diboride an ultra-hard material? J. Am. Chem. Soc. 2008, 130,

7200

[2] Rybkovskiy, D.; Kvashnin, A. G.; Oganov, A. R. et al. Crystal Structure and Superhardness of Molybdenum

Borides: Theory and Experiment. J.Phys.Chem.Lett. 2020, *11* (9),3591-3596.

DOI: 10.1021/acs.jpclett.0c00837

铁氮化物: 高压合成、氮无序与局域磁矩

陶雨、雷力

四川大学 原子与分子物理研究所 Email: lei@scu.edu.cn

摘要:铁氮化物(Fe_xN_y)被认为是下一代新型铁磁材料的有力候选者。然而,实现高质量、结构与磁性能可调的块体铁氮化物的合成仍然面临诸多挑战。目前,关于铁氮化物磁性的实验与理论研究结果仍存在一定争议。随着高压技术的不断发展,高压合成技术为氮化铁的制备开辟了新的路径,提供了多维度调控结构与磁性的可能。本工作总结了近年来铁氮化物高压合成的研究进展,特别关注基于大腔体压机的高压固相复分解反应(HSM)。我们归纳了 HSM 反应的特点。HSM 反应具有独特的矢量合成特性,同时在高温条件下能够促进氮的无序扩散。HSM 反应不仅可用于合成多元铁基金属氮化物,还能调控局域磁矩,可作为调控铁氮化物结构与磁性的关键手段。借助中子衍射在解析铁氮化物局域磁矩与氮无序分布方面的独特优势,本工作揭示了铁局域磁矩与氮含量之间的内在关系。此外,随着基于大腔体压机的高压原位成像技术的发展,可对 HSM 反应过程进行实时原位观测。本工作同时报道了我们在铁氮化物的中子衍射及高压原位成像研究方面的最新实验进展。



图 1 铁氮化物的高压合成相图

关键词: 铁氮化物;高压合成 参考文献

1. Yu Tao and Li Lei, Iron nitrides: High-pressure synthesis, nitrogen disordering and local magnetic moment. *Chin. Phys. B*, 2025, 34: 068301.

Pressure generation under deformation in a large-volume press <u>Saisai Wang</u>, Xinyu Zhao, Kuo Hu, Bingtao Feng, Xuyuan Hou, Yiming Zhang, Shucheng Liu, Yuchen Shang, Zhaodong Liu, Mingguang Yao, and Bingbing Li State Key Laboratory of Superhard Materials, Synergetic Extreme Condition User Facility, College of Physics, Jilin University, Changchun 130012, China Email: sswang21@mails.jlu.edu.cn

Abstract:

Deformation can change the transition pathway of materials under high pressure, thus significantly affects physical and chemical properties of matters. However, accurate pressure calibration under deformation is challenging and thereby causes relatively large pressure uncertainties in deformation experiments, resulting in the synthesis of complex multiphase materials. Here, pressure generations of three types of deformation assemblies were well calibrated in a Walker-type large-volume press (LVP) by electrical resistance measurements combined with finite element simulations (FESs). Hard Al_2O_3 or diamond pistons in shear and uniaxial deformation assemblies significantly increase the efficiency of pressure generation compared with the conventional quasi-hydrostatic assembly. The uniaxial deformation assembly using flat diamond pistons possesses the highest efficiency in these deformation assemblies. This finding is further confirmed by stress distribution analysis based on FESs. With this deformation assembly, we found shear can effectively promote the transformation of C_{60} into diamond under high pressure and realized the synthesis of phase-pure diamond at relatively moderate pressure and temperature conditions. The present developed techniques will help improve pressure efficiencies in LVP and explore the new physical and chemical properties of materials under deformation in both science and technology.

Keywords: shear/uniaxial deformation, pressure calibration, finite element simulations, large-volume press, high pressure

Reference

1. Saisai Wang et al 2024 Chinese Phys. B 33 098104

高压下三元 A15-(Lu, Y)₄H₂₃的合成与超导电性

<u>张可欣</u>、于敬坤、张昱晨、郭鉴宁、王煜龙、姜闯、黄晓丽、崔田 吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室 Email: zhangkx21@mails.jlu.edu.cn

摘要:

通过在二元氢化物中引入新元素而形成的三元氢化物是提高超导转变温度(*T*_c)或降低稳定压力的 重要途径。在这项工作中,我们选择了由Lu原子和Y原子形成的三元氢化物,其灵感来自于Lu-H体 系的低稳定压力(其完全充满4f电子)以及Y-H体系的较高*T*_c。通过有效控制高压和高温条件,我们 成功合成了*Pm-3n*(Lu,Y)4H₂₃(A15型)。合成的*Pm-3n*(Lu,Y)4H₂₃在215 GPa下的最高*T*_c为112 K, 创下A15型超导体的最高*T*_c记录。与二元*Pm-3n*Lu₄H₂₃相比,*Pm-3n*(Lu,Y)4H₂₃的*T*_c提高了约60%, 上临界磁场µ₀H_{c2}(0)提高了约61%。有趣的是,与*Pm-3n*Lu₄H₂₃相比,*Pm-3n*(Lu,Y)4H₂₃由于引入了Y原 子,体积略有膨胀,H-H键距离略有增加。综合理论计算和实验分析表明,用Y原子取代Lu原子后, H-H键的扩展导致电子带和声子软化的改变,从而增强了电子-声子耦合(EPC),共同推动了*Pm-3n*(Lu, Y)4H₂₃中*T*_c的显著增强。我们的工作展示了调整和增强氢化物超导性能的重要策略,并为开发三元氢 化物提供了宝贵的实践经验。



Laser

图 1 高压装置示意图和 Pm-3n (Lu, Y)4H23 的电输运性质

关键词: 高压、超导电性、三元氢化物 参考文献

- 1. N. W. Ashcroft, Metallic hydrogen: a high-temperature superconductor?, Phys. Rev. Lett. 21, 1748 (1968).
- 2. J. Xu and Z. Zhu, Metallic hydrogen, Physics 6, 296 (1977).

镱的氢化物的高压合成与超导研究

张思佳、李芷文、望贤成、靳常青

中国科学院物理研究所 Email: sjzhang@iphy.ac.cn

摘要:

近年来,氢化物由于其接近室温的超导转变温度受到了广泛关注,越来越多具有超导电性的氢化物 被发现。我们采用金刚石对顶砧结合原位高压激光加热技术成功合成了镱的氢化物。高压下的电阻温度 测量结果表明,样品在 180 GPa 压力下呈现 11.5 K 的超导转变。其超导特性在外磁场下的研究表明, 零温上临界场µ₀H₂₂(0)约为 5 特斯拉。通过原位高压 X 射线衍射实验分析,观测到的超导现象源于 Pm-3n 对称性的 Yb₄H₂₃ 物相。研究认为,Yb₄H₂₃ 体系中相对较低的超导转变温度(T_e)可能与高压条件下镱 元素特殊的局域磁矩特性密切相关。



图 1 Yb₄H₂₃在 180 GPa 压力下的电阻温度曲线

关键词:(高压、超导) 参考文献

- Drozdov A P, Kong P P, Minkov V S, Besedin S P, Kuzovnikov M A, Mozaffari S, Balicas L, Balakirev F F, Graf D E, Prakapenka V B, Greenberg E, Knyazev D A, Tkacz M, and Eremets M I (2019) Nature 569 528
- Li Z W, He X, Zhang C L, Wang X C, Zhang S J, Jia Y T, Feng S M, Lu K, Zhao J F, Zhang J, Min B S, Long Y W, Yu R C, Wang L H, Ye M Y, Zhang Z S, Prakapenka V, Chariton S, Ginsberg P A, Bass J, Yuan S H, Liu H Z, and Jin C Q (2022) Nat. Commun. 13 2863

cBN-Si₃N₄复合材料的高温高压制备及其性能研究

张松朋、马帅领*、连敏、崔田*

宁波大学高压物理科学研究院 Email: pp148168@163.com

摘要: 立方氮化硼(cBN)是硬度仅次于金刚石的陶瓷材料,具有高热稳定性、宽带隙、 高导热性,特别是对铁族金属及其合金的化学惰性,在工业上得到广泛应用^[1-4]。由于 cBN 单晶尺寸小且各向异性,断裂韧性通常只有 2~3 MPa·m^{1/2[5,6]}。虽然多晶 cBN 的尺寸可以满 足工业需求,但硬度明显降低。由于硬度和韧性的内在矛盾,cBN 硬度高,韧性差,这使 得其在高冲击环境下的使用寿命和性能受到限制,极大地限制了 cBN 的广泛应用。制备大 尺寸 cBN 复合材料的传统方法一般是通过添加金属、陶瓷等烧结剂来改善其性能。这种工 艺虽然在一定程度上增强了材料的韧性,但会显著降低其硬度。最新报道氮化硅在高温下会 发生α相与β相之间的转变。在这个过程中,具有特定取向关系的α-Si₃N₄和β-Si₃N₄晶粒被直 接整合。该样品显示了共晶结构,由于氮化硅在应力作用下的相变,氮化硅表现出极高的断 裂韧性。因此,制备 cBN-Si₃N₄ 复合材料有可能会提高 cBN 的断裂韧性等性质。

本工作利用高温高压法成功合成出不同比例的 cBN-Si₃N₄ 复合材料,显微硬度测量结果 表明:复合材料维氏硬度可达 41.6 GPa,达到超硬材料阈值,断裂韧性也达到 cBN 单晶的 2~3 倍。热重差热的测试结果表明:其抗氧化性也较 cBN 单晶有了较大的提高。



(a)cBN-Si₃N₄的维氏硬度与温度的关系 (b)cBN-Si₃N₄的维氏硬度与载荷的关系 (c)cBN-Si₃N₄的纳米压痕硬度与温度的关系 (d)cBN-Si₃N₄的杨氏模量与温度的关系 (e)cBN-Si₃N₄的断裂韧性与温度的关系 (f)cBN-Si₃N₄(1%)复合材料的热重差热曲线

六方金刚石的合成研究

陈德斯、董家君、姚明光

吉林大学物理学院吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: yaomg@jlu.edu.cn

摘要:

金刚石(Fd-3m),不仅是自然界已知最坚硬的物质,更是集极高硬度、极耐磨、极高热导率、极宽禁带等优异性能于一体的重要前沿战略材料。而六方金刚石(P63/mmc)自 1967 年首次在陨石中被发现以来^[1],因其比立方金刚石高 58%的理论硬度、更窄的电子带隙(4.5 eV)等独特性质备受关注。然而,六方金刚石在自然界仅以微量的纳米结构形式存在于陨石坑碎片中。自发现至今,没有人工合成六方金刚石的有效手段,且六方金刚石的形成机制尚未定论。过去六十年间,尽管冲击压缩法和静态高压法被广泛尝试,但所得产物多为混相^[2-5],六方含量较低,常以纳米级缺陷结构(如层错、孪晶)形式嵌于立方金刚石基体,导致其独立存在性备受争议^[6,7]。这一困境不仅阻碍了超硬材料性能的突破,更限制了其在半导体、量子传感等领域的发展应用。在这里,我们利用 DAC 激光加热技术,通过加热高度压缩的石墨来合成结晶良好的、近纯的六方金刚石。结合实验和理论分析,揭示了石墨由后石墨相转变为六方金刚石的全新路径。利用这种方法,获得了具有高定向层状结构特点的毫米级六方金刚石块材,其具有优于单晶金刚石的超高硬度(>150 Gpa)和优异的热稳定性(热分解温度>1200 ℃)^[8]。该研究结果不仅为六方金刚石材料的合成提供了新思路,还填补了六方金刚石在宏观物性数据库中的关键空白,为其在超硬材料领域的应用提供了重要的理论依据和实验支撑。



图 1 a. 单晶石墨 50 GPa 激光加热前后光学照片. b, 单晶石墨 50 GPa 激光加热后获得的六方 金刚石沿不同带轴的高分辨透射电镜图. c, 毫米级六方金刚石块材沿 c 轴 fib 透射制样后低 倍率透射电镜图, 其中左上角为对应区域的电子衍射结果. d, 六方金刚石[001]带轴的高分辨 透射电镜图, 左上角为该带轴的理论电子衍射结果. e, 沿合成的六方金刚石块材不同方向 XRD 测试结果, 左上角为对应的入射方向示意图. f, 六方金刚石块材不同方向的维氏硬度值 随载荷变化曲线.

关键词: 六方金刚石; 高温高压; 相变机制; 超硬材料

内嵌金属富勒烯的高压结构转变与电输运性质研究

尹思1,张盈1,董家君1,姚明光2.*

¹吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室,吉林长春,130012 ²吉林大学物理学院,吉林长春,130012

*Email: yaomg@jlu.edu.cn

摘要:

作为碳家族中的明星材料,零维富勒烯分子因其独特的笼状结构和成键形式易于调控等特点,是构 筑新型碳结构的理想基元。高压下,富勒烯的成键形式发生变化,伴随着碳笼的形变和塌缩,从而发生 新奇的结构相变。相比于 C₆₀、C₇₀ 等空心富勒烯,内嵌金属富勒烯的性质与内嵌金属种类、碳笼尺寸 以及内嵌金属与碳笼间作用密切相关,为富勒烯的高压研究带来新的机遇。结合多种金刚石对顶砧高压 技术,本工作揭示了内嵌金属富勒烯 DyCN@C₈₂*间二甲苯共晶在常压下是一种绝缘体,随着压力的增 加,样品发生绝缘体向窄带隙半导体的转变,导电主要由电子导电贡献。随着压力的进一步增大, DyCN@C₈₂*间二甲苯共晶内发生聚合反应,发生 sp²向 sp³杂化键转变,使电子的局域性增强,因此 电阻增加,导电性变差,同时伴随着反常的带隙展宽现象。相比之下,空心富勒烯以及富勒烯共晶材料 在发生非晶化前,其带隙均是减小的,这主要是因为 DyCN@C₈₂*间二甲苯共晶内部的金属离子与碳原 子耦合增强,出现了反常的压致带隙展宽。我们的研究表明,在碳笼内引入金属,对富勒烯材料的结构 变化和电输运性质具有很大的影响,为构筑具有优异电学性能的新型碳材料提供了新思路。



图 1. DyCN@C82*间二甲苯高压下的低温电阻、电阻和带隙曲线。

关键词: 高压, 内嵌金属富勒烯, 结构相变, 电输运性质 参考文献

- Wang L, Liu B, Li H, et al. Long-Range Ordered Carbon Clusters: A Crystalline Material with Amorphous Building Blocks [J]. Science, 2012, 337(6096): 825-.
- Yang S, Wei T, Jin F. When metal clusters meet carbon cages: endohedral clusterfullerenes [J]. Chemical Society Reviews, 2017, 46(16): 5005-58.

专题代号: C

氢基高温超导体的理论设计与实验合成

<u>高国英*</u>、宋晓旭、郝晓宽、魏旭东、梁笑微、徐波、王霖、田永君 燕山大学亚稳材料全国重点实验室

Email: gaoguoying@ysu.edu.cn

报告摘要:

自上世纪初发现超导电性以来,实现室温超导一直是人类的梦想。根据 BCS 理论[1],作为自然界中原 子量最小的元素,氢应该具有极高的德拜温度和很强的电子-声子耦合强度,从而可能具有高温超导电 性。然而,在现有的实验条件下,人们仍然没有观察到金属氢的确切证据。2004年,Ashcroft 指出富氢 材料中氢受到其他元素的化学预压缩,在外加压强下,其金属化压强会远低于纯氢,从而引发了富氢材 料高温超导的研究热潮[2]。其后,人们相继预测并实验观察到了 H₃S、LaH₁₀和 CaH₆等的高温超导电 性,最高达 260K (LaH₁₀,170GPa)[3]。然而,这些材料至少在百万大气压以上才能稳定存在。

理论上,通过在二元笼型富氢超导材料中引入其他金属元素,可有效提高富氢超导材料的位形熵, 降低稳定压强,提高超导转变温度。本课题组设计出具有笼型结构的三元氢化物 CaYH₁₂,与具有相同 结构的 CaH₆相比,Y 的引入不仅将稳定压强降低了 15GPa,而且将超导转变温度提升了 23K,这为进 一步降低富氢材料稳定压强、提高超导转变温度提供了线索[4]。另外,以A15 结构为原型,通过元素 替代的方法,我们设计出多种以类A15 结构稳定的三元氢化物,其中AlTiH₆,AlZrH₆,AlHfH₆,GaTiH₆, GaZrH₆和 GaHfH₆的动力学稳定压强可低至 20GPa 及以下,并具有较高的超导转变温度[5,6]。除了结 构替代的方法,我们还设计出一种具有新结构类型的三元氢化物 LaBH₈,结构中,La占据面心立方晶 格位置并提供电子使得 B 与 8 个 H 共价键合形成 BH₈单元,并实现了全氢原子化,其最低稳定压强为 50GPa,超导转变温度(*T_c*)为 154K[7]。后续的理论研究又设计出系列具有类似结构类型的三元氢化物高 温超导体,其中 LaBeH₈的最低稳定压强为 20GPa,对应的超导转变温度为 185K[8]。最近,实验成功 合成了 LaBeH₈,它具有与 LaBH₈相同的结构,且超导转变温度超过 100 K[9]。理论上,我们基于理论 预测指导实验合成的三元富氢化合物 LaBeH₈ (LaBH₈)结构构型,通过替代掺杂的方法设计了八种在百 万大气压以内动力学稳定的四元富氢高温超导体。其中 LaThBe₂H₁₆, AcBaSi₂H₁₆, ACSrSi₂H₁₆ 和 YCeBe₂H₁₆在 50 GPa 以内的超导转变温度超过了 100 K,超过了液氮温度;而 LaYBe₂H₁₆在 75 GPa 下 具有超导转变温度最高,为 221 K。[10]

实验上,我们以La、B和NH₃BH₃为原料进行了高温高压合成,成功获得了一种La-B-H 三元氢化物,电学输运测量结果表明其在高压下具有较高的*T_c*,并且在 90GPa 时达到最高,为 106K。X 射线衍射数据结合电学输运测量以及第一性原理计算结果,得出该三元氢化物可能为LaB₂H₈,结构中含有 B₂H₈

单元,随着压力的降低,氢的含量可能会减少。X射线衍射数据表明三元氢化物最低能够稳定至59GPa,这是目前实验合成的高温超导氢化物能够稳定的最低压力。该研究为后续在三元甚至多元氢化物中探索常压稳定的高温超导体提供了思路和参考。

关键词: (三元氢化物,超导电性,高温高压,第一性原理计算,金刚石对顶砧) 参考文献

- 1. J. Bardeen et al., Phys. Rev. 108, 1175 (1957)
- 2. N. W. Ashcroft, Phys. Rev. Lett. 92, 187002 (2004)
- 3. A. P. Drozdov et al., Nature 569, 528 (2019)
- 4. Xiaowei Liang, Guoying Gao* et al., Phys. Rev. B 99, 100505(R) (2019)
- 5. Xudong Wei, Guoying Gao* et al., Mater. Tod. Phys. 34, 101086 (2023)
- 6. Xiaowei Liang, Guoying Gao*, Yongjun Tian et al., Matter Radiat. Extrem. 9, 018401 (2024).
- 7. Xiaowei Liang, Guoying Gao* et al., Phys. Rev. B 104, 134501 (2021)
- 8. Z. Zhang, T. Cui, M. J. Hutcheon, D. Duan, C. J. Pickard, Y. Yao et al., Phys. Rev. Lett. 128, 047001 (2022)
- 9. Y. Song, J. Bi, Y. Nakamoto, K. Shimizu, H. Liu, G. Liu, H. Wang, Y. Ma, Phys. Rev. Lett. 130, 266001 (2023)
- 10. Xudong Wei, Guoying Gao*, Yongjun Tian et al., Adv. Funct. Mater. 2419457 (2024).
- 11. Xiaoxu Song, Guoying Gao*, Yongjun Tian et al., J. Am. Chem. Soc. 146, 13797 (2024).

高压下多元氢化物高温超导体的实验研究

<u>黄晓丽</u>

吉林大学高压与超硬材料国家重点实验室,物理学院,长春130012 Email: huangxiaoli@jlu.edu.cn

摘要:

自 1911 年发现汞的零电阻现象开始,高温乃至室温超导体的研究一直是科学家们追逐的焦点课题。 近年来,科学家们提出在富氢化合物中寻找金属氢和高温超导体的学术思想。由于非氢元素的存在,对 氢的子晶格有化学预压的作用,因此富氢化合物在较低压力下能实现金属化和超导转变;富氢化合物具 有高德拜温度和强电声耦合等特点,是潜在的高温超导体。目前实验证实的富氢化合物高温超导体主要 分为两类:第1类是以H₃S为代表的共价型氢化物,第2类是以LaH₁₀为代表的笼型氢化物,这两类氢 化物在高压下超导温度均超过 200 K,引领了富氢化合物超导体的研究热潮。

通过引入多种非氢元素调控氢晶格形成多元富氢化物,有助于进一步提升超导性能或降低所需合成 压力。在本报告中,主要介绍新近发现的多元富氢化物高温超导体。例如,以La-Ce固溶体合金为前驱 物,在高温高压条件下成功合成高温超导三元氢化物 *P*6₃/*mmc*-(La,Ce)H₉,在 100 GPa 时超导温度达 176 K,临界磁场达 235 T,比二元镧氢化物和铈氢化物的超导温度提高了 80%。该体系是目前已知的百万 大气压以下超导温度最高的合金型富氢化物超导体。利用类似的学术思想,通过引入适当含量的铝原子, 成功地在 146 GPa 下将理论预测在 420 GPa 以上才能稳定的 *P*6₃/*mmc*-LaH₁₀ 稳定下来,合成的 *P*6₃/*mmc*-(La, Al)H₁₀超导温度最高可达 223 K。这一系列研究工作激发了对多元氢化物超导体的实验探 索,并为室温超导体的研究提供了新的研究方向和思路。

关键词: 高压超导、富氢化合物、金刚石对顶砧装置、晶体结构

参考文献

- [1] D. Duan, and T. Cui. et al. Sci. Rep. 4, 6968 (2014).
- [2] A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, S. I. Shylin. Nature 525, 73-76 (2015).
- [3] F. Peng, Y. Sun, C. J. Pickard, R. J. Needs, Q. Wu, and Y. Ma. Phys. Rev. Lett. 119, 107001 (2017).
- [4] H. Liu, I. I. Naumov, R. Hoffmann, N. W. Ashcroft, and R. J. Hemley. PNAS 114, 6990-6995 (2017).
- [5] A. P. Drozdov, V. S. Minkov, and M. I. Eremets et al. Nature 569, 528 (2019).
- [6] X. Li, X. Huang, D. Duan, C. J. Pickard, D. Zhou, H. Xie et al. Nat. Commun. 10, 3461 (2019).
- [7] W. Chen, D. V. Semenok, X. Huang, X. Li, D. Duan et al. Phys. Rev. Lett. 127, 117001 (2021).
- [8] D. Zhou, D. V. Semenok, X. Huang, A. R. Oganov, and T. Cui et al. Sci. Adv. 6, eaax6849 (2020).
- [9] S. Chen, Y. Qian, X. Huang, W. Chen, H. Yuan, and T. Cui et al. Natl. Sci. Rev. nwad107 (2023).
- [10] P. Bhattacharyya, W. Chen, X. Huang et al. Nature 627, 73–79 (2024).

专题代号: C

超高压极端条件下高温超导体的探索

<u>孔盼盼</u>、靳常青

中国科学院物理研究所极端条件重点实验室 中国科学院大学物理学院

摘要:超导是 20 世纪物质科学最重要的发现之一。其零电阻和完全抗磁性具有巨大的应用价值,为材料、信息和能源技术的颠覆性跨越提供了可能。室温超导一直是凝聚态物理和材料科学领域追逐的梦想。 压力、温度和化学组分是决定物质结构和性质的三个基本物理学参量。高压可有效的缩短原子间距离, 改变原子(分子)间的相互作用、物质的电子和晶体结构,使之达到高压下新的平衡态,从而构建异于 常压物质的新材料、新性质和新现象。根据 BCS 和"化学预压"理论,金属氢和富氢化物是实现高温/室 温超导的理想候选。报告人长期致力于超高压极端条件下金属氢和新型富氢高温超导体研究,首次在超 高压条件下利用电阻测量直接观测到氢的半金属化¹,实现了近百年金属氢研究进程中的重大突破;首 次实验发现具有笼型结构且 T_c为 250 K 的 LaH₁₀富氢高温超导体²,刷新了超导转变温度的世界最高记 录;首次实验发现 T_c为 243 K 的 YH₉富氢高温超导体³,拓展了近室温超导的新体系。同时,报告人 还将介绍超高压对乙硅烷超导电性的调控规律。

关键词: 超导; 超高压; 金属氢; 富氢高温超导体; 乙硅烷

参考文献(中文小五号宋体,其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- 1. Eremets, M. I., Drozdov, A. P., Kong, P. P. & Wang, H., Nat. Phys. 2019, 15: 1246.
- 2. Drozdov, A. P., Kong, P. P., Minkov, V. S. et al., Nature 2019, 569: 528.
- 3. Kong, P. P., Minkov, V. S., Kuzovnikov, M. A. et al., Nat. Commun. 2021, 12: 5075.

专题代号: C

系列锰基化合物中压力诱导/增强的超导电性

<u>李庆</u>, 张英杰, 项浙宁, 朱怡杰, 鲁清, 孙建, 闻海虎 南京大学物理学院超导物理与材料研究中心, 南京 210093 Email: gingli@nju.edu.cn; jiansun@nju.edu.cn; hhwen@nju.edu.cn

摘要: 锰(Mn)为典型的具有 3d 轨道电子的过渡金属元素,含有 3d 轨道电子的化合物通常具有丰 富的量子态和新奇量子现象,如非常规超导等。在 3d 过渡金属元素中以 Mn 的磁性最强,由于磁性 与超导之间天然的不兼容性,在探索新超导体的过程中人们通常避免使用 Mn 元素。目前在 Mn 基材 料中发现的超导电性非常少,且已发现的几种超导材料超导转变温度 (T_o) 都很低。最近,我们利用 金刚石对顶砧技术实现了160万大气压下的极端测量环境,并研究 了 Mn 掺杂 Til-xMnx 合金的掺杂 相图和压力效应,发现压力可以诱导得到最高 26 K 的超导电性,是该材料常压下 T_e (2.5 K) 值的十 倍,也是已报到的含 Mn 材料中超导转变温度最高的合金超导体,为含 Mn 化合物中高温超导电性的 探索提供了重要线索^[1,2]。进一步地,我们将磁性元素 Mn 和轻元素硼(B)相结合,利用高压在富含 B 元素的锰基材料 MnB4 中诱导出高达 14.2 K 的超导电性,是目前已知锰基超导体中最高的^[3]。同步辐 射结构测试发现高压下材料的晶格参数 b 和 c 在 60-90 GPa 发生了反常的数值交叉,与超导性的出现 密切相关。进一步的理论计算发现 MnB4 中如此高的 T。无法仅仅用基于电-声子耦合的 BCS 图像所描 述,可能预示着该材料非常规的超导配对机制。更为重要的是,我们提出了一种将磁性过渡金属元素 和轻元素相结合的新超导材料探索思路,即 MHFV 模型(Magnetic moments plus High Frequency Vibrations)。在上述模型中,超导的配对可能不再依靠基于 BCS 理论的电-声子相互作用,而是轻元 素介导的强的自旋涨落。我们的系列研究为在 3d 过渡金属磁性材料中寻找更高 T。的新型非常规超导 材料提供了新的平台和途径。

关键词:新超导现象;锰基超导;压力效应;非常规超导

参考文献:

- 1. Y.-J. Zhang, Qing Li*, Zhengyan Zhu, Yiwen Li, Wei Xie, Hai-Hu Wen*, Phys. Rev. B 108, 054516 (2023).
- Ying-Jie Zhang[†], Yijie Zhu[†], Qing Li^{*}, Zhe-Ning Xiang, Tianheng Huang, Jian Sun^{*} and Hai-Hu Wen^{*}, J. Am. Chem. Soc. 146, 21110 (2024).
- Zhe-Ning Xiang[†], Ying-Jie Zhang[†], Qing Lu[†], Qing Li^{*}, Yiwen Li, Tianheng Huang, Yijie Zhu, Yongze Ye, Jian Sun^{*}, and Hai-Hu Wen^{*} Adv. Mater. 37, 2416882 (2025).

高压下氢基超导体的实验探索

刘广韬

过去十余年,随着 SH₃、CaH₆^[1]和 LaH₁₀等新型富氢化合物在理论预测与实验中相继实 现超过 200K 的超导温度,氢基高温超导体在高压强条件下的研究受到了广泛关注。相比于 二元体系,多元富氢化合物因其更高的结构自由度,在高压下发现高温超导体方面展现出更 大的潜力,已经成为领域的重要研究方向之一。近年来,我们借助金刚石对顶砧加热技术, 在百万大气压条件下成合成并表征了一系列新型氢基高温超导体,包括 LaBeH₈^[2] (La,Ce)H₉^[3] 和(La,Ce,Y)H₁₀^[4]。最近,我们在 Nb-H 体系^[5]中发现,氢空位缺陷在氢化物超导体的稳定性 中起到了关键作用。这些实验研究为高压下新型高温超导体的探索和机制理解提供了启示。

[1] Ma et al., Phys. Rev. Lett. 128, 167001 (2022)

[2] Song et al., Phys. Rev. Lett. 130, 266001 (2023)

[3] Bi et al., Nat. Commun. 13, 5952 (2022)

[4] Ma et al., *Phys. Rev. B* 111, 024505 (2025)

[5] Ma et al., J. Am. Chem. Soc. 147, 11028 (2025)

专题代号:C

高压下双层和三层 RP 相镍氧化物的非常规超导电性理论研究

江恺悦¹,曹宇晗²,杨庆庚²,王达^{2,3,*},路洪艳^{1,**},王强华^{2,3,***}

1曲阜师范大学物理工程学院,曲阜, 273165

²南京大学固体微结构物理国家重点实验室&南京大学物理学院,南京,210093
 ³南京大学人工微结构科学与技术协同创新中心,南京,210093
 Email: *dawang@nju.edu.cn, **hylu@qfnu.edu.cn, ***qhwang@nju.edu.cn

摘要:近年来,镍氧化物超导电性成为备受瞩目的焦点。双层 Ruddlesden-Popper(RP)相镍氧化物 La₃Ni₂O₇在高压下实现了 80 K 的超导电性。进一步实验揭示了 La₃Ni₂O₇中奇特的近直角三角形的超导 转变温度-压力相图,与铜基和铁基超导体中的穹顶形相图明显不同。此外,研究表明三层 RP 相镍氧 化物 La₄Ni₃O₁₀ 也表现出超导性。解释双层镍基超导体的反常相图,并揭示双层和三层镍基超导体的超 导机制是镍基超导研究中亟待解决的难点问题。基于此,我们结合第一性原理计算和奇异模泛函数重整 化群方法对两个体系开展了研究。首先,研究了 La₃Ni₂O₇和 La₄Ni₃O₁₀在高压下的电子结构,并构建了 不同压力下的紧束缚模型和电子相互作用参数。随后,利用奇异模泛函重整化群方法研究了其电子关联 效应和非常规超导电性,揭示了高压下双层和三层镍基超导体的自旋涨落机制和 *s*±波配对对称性^[1,2], 并解释了前者奇特的超导-压力相图^[1]。值得强调的是,我们首次基于巡游电子图像的自旋涨落机制解 释了双层镍基超导体的奇特超导-压力相图,这是从电子局域自旋图像所不能得到的。该研究为深入理 解镍氧化物超导机制提供了重要的见解,为最终确定镍基超导的微观机理指明了方向^[1]。



图 1 La₃Ni₂O₇超导转变温度-压力相图

关键词: RP 相镍氧化物; 非常规超导; 第一性原理计算; 泛函重整化群 参考文献

 Kai-Yue Jiang, Yu-Han Cao, Qing-Geng Yang, Hong-Yan Lu*, and Qiang-Hua Wang*, "Theory of Pressure Dependence of Superconductivity in Bilayer Nickelate La₃Ni₂O₇", *Phys. Rev. Lett.* 134, 076001 (2025).

2. Qing-Geng Yang, Kai-Yue Jiang, Da Wang*, **Hong-Yan Lu***, and Qiang-Hua Wang*, "Effective model and s±-wave superconductivity in trilayer nickelate La₄Ni₃O₁₀", *Phys. Rev. B* (Letter 形式) 109, L220506 (2024).

高压下铋基富氢化合物高温超导体的实验研究

马良1,2*, 单鹏飞1,3*, 程金光1,*

¹中国科学院物理研究所,北京,100190 ²郑州大学物理学院,郑州,450001 3北京高压科学研究中心,北京,100193

* ml9533@zzu.edu.cn; * pengfei.shan@hpstar.ac.cn; * jgcheng@iphy.ac.cn

近期,一系列高压富氢化合物高温超导体的发现刷新了超导转变温度的最高纪录,开创了高温 超导研究的新时代 [1,2]。然而氢化物高温超导体仍然存在着合成压强过高,超导结构类型单一等问 题。在2015年,Ashcroft曾提到具有更大相对原子质量的元素在高压下的氢化物金属化临界压强可能 更低 [3]。作为元素周期表中相对原子质量最大的非放射性元素,Bi元素则有望在更低的压强下与氢 形成高温超导体。此外,在早期Bi-H体系的结构预测研究中,也发现了一系列在高压下T.接近100 K 的铋氢化合物 [4]。受此启发,我们近期在实验上针对高压下Bi-H体系展开系统研究,以单质Bi与 BH₃NH₃为初始反应物,在高温高压条件下成功合成两种分子型氢化物超导体BiH₂和BiH₄。原位高压 电学测量结果表明BiH₂和BiH₄在170 GPa左右分别具有约50 K和90 K的超导转变温度。后续的理论计 算发现,不同于H₃S和LaH₁₀这些类型的氢化物中费米面附近高比例的氢元素电子态密度贡献,Bi-H 体系中氢元素电子在费米面附近态密度贡献较低,Bi元素对于高温超导占据主导贡献。我们当前的 结果能够扩大高压氢化物超导材料的研究范围,为将来在更多样化的结构类别中寻找高温超导体提 供参考。

关键词: 富氢化合物; 高压物理; 高温超导体

参考文献

- [1] J. A. Flores-Livas, L. Boeri, A. Sanna, G. Profeta, R. Arita, and M. Eremets, A perspective on conventional high-temperature superconductors at high pressure: Methods and materials, *Phys. Rep.* 856, 1 (2020).
- [2] J. Lv, Y. Sun, H. Liu, and Y. Ma, Theory-orientated discovery of high-temperature superconductors in superhydrides stabilized under high pressure, *Matter Radiat. Extremes* 5, 068101 (2020).
- [3] K. Abe1 and N. W. Ashcroft, Stabilization and highly metallic properties of heavy group-V hydrides at high pressures, *Phys. Rev. B* 92, 224109 (2015).
- [4] Y. Ma et al, High-pressure structures and superconductivity of bismuth hydrides, arXiv.1511.05291 (2015).

Pressure-induced strange metal phase in a metallic kagome ferromagnet

<u>Bin Shen</u>¹, Feng Du², Franziska Breitner¹, Victoria A. Ginga³, Ece

Uykur⁴, Alexander A. Tsirlin³, Philipp Gegenwart¹

¹Experimental Physics VI, Center for Electronic Correlations and Magnetism, University of Augsburg, 86159 Augsburg, Germany

²Max Planck Institute for Chemistry, Hahn Meitner Weg 1, Mainz 55128, Germany

³Felix Bloch Institute for Solid-State Physics, University of Leipzig, 04103 Leipzig, Germany

⁴Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Inst Ion Beam Phys & Mat Res, 01328 Dresden,

Germany

Email: bin.shen@physik.uni-augsburg.de

摘要: Strange metallicity with T-linear electrical resistance, preceding high-Tc superconductivity is an enigmatic, yet crucial, signature of correlation physics. We study the hydrostatic pressure dependence of ferromagnetism in the kagome metal CrNiAs by electrical transport and magnetization measurements up to 50 GPa [1]. In contrast to other kagome ferromagnets, a linear suppression of the Curie temperature is found, resulting in a ferromagnetic quantum critical point at a critical pressure $pc \sim 12$ GPa. Remarkably, from pc up to the maximal measured pressure, a broad strange metal phase arises, which at low temperatures can be converted to a Fermi liquid in applied magnetic field, phenomenologically described by a zero-field quantum critical line in the T-p phase diagram. This establishes pressurized kagome ferromagnets as intriguing platform for strange metal behavior.

关键词: Ferromagnetism, quantum phase transition, strange metal, pressure

参考文献

1. Bin Shen et al., arXiv:2503.09524 (2025)

高压下重镧系金属的强关联效应

<u>宋静</u>

中国科学院物理研究所 Email: jingsong@iphy.ac.cn

摘要:

常压下,镧系金属由于 RKKY 相互作用在室温以下会形成长程磁有序。然而,在高压下,预期镧 系元素的 4*f* 态将变得不稳定,从而导致 Kondo 相互作用和 RKKY 相互作用之间的竞争,产生强关联效 应和奇异的物理现象。最近,在超高压条件下,重镧系金属铒(Er)表现出磁有序温度(*T*_o)异常增强 [1],与之前的 Nd [2]和 Dy [3]等情形类似。同时,在稀磁合金 Y(Er)中观察到强的超导对拆分和电阻率 最小值,揭示了 Kondo 效应的存在,这实际上是造成磁有序异常增强的原因。此外,X 射线近边吸收 谱(XANES)测量表明,Er 一直保持 3+价到至少 123GPa。

不同于大多数镧系金属,镱在常压下并不表现出磁有序,因为二价的镱具有填满的4f轨道而表现为 磁惰性。高压可以显着改变材料的基态,有望引起Yb中4/电子的离域化效应。通过超高压低温条件下的 电阻率和交流磁化率测量发现,镱金属在1.5K以上180GPa以下一直都表现为非磁性,但在86GPa以上镱 金属出现超导电性[4]。此外,X射线吸收谱表明镱金属呈现混合价态至少到125 GPa,说明4f电子在超 导电性的出现起到了积极作用,镱金属的超导电性是非常规的。

关键词:镧系、磁性、超导

参考文献:

- Hongyu Liu, Jing Song*, Wei Wu, Baosen Min, Sijia Zhang, Shaomin Feng, Xiancheng Wang, and Changqing Jin*, Phys. Rev. B 111, 125117 (2025).
- [2] J. Song, W. Bi, D. Haskel, and J. S. Schilling, Phys. Rev. B 95, 205138 (2017).
- [3] J. Lim, G. Fabbris, D. Haskel, and J. S. Schilling, Phys. Rev. B 91, 045116 (2015).
- [4] J. Song, G. Fabbris, W. Bi, D. Haskel, and J. S. Schilling, Phys. Rev. Lett. 121, 037004 (2018).

高压下单质钛和硫的超导电性以及新奇电输运行为

王洪波

吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室 Email: whb2477@jlu.edu.cn

摘要:

材料的超导电性和与超导相关的新奇输运行为一直是凝聚态物理领域的研究热点。这些新奇的输运 行为多存在于低维体系或无序体系,与量子限域效应、强关联效应、界面效应、无序度等复杂的量子效 应相关联,这些复杂的量子效应阻碍了对其物理机制的探索。我们系统研究了单质钛和单质硫在超高压、 极低温、强磁场极端条件下的电输运行为。在单质钛中,我们观测到 25 K (135 GPa)的超导转变温度, 并在磁场诱导下出现超导态-反常金属态的转变 (Fig. 1);在单质硫中,我们观测到磁场诱导的金属--玻 色绝缘体--超导体的转变 (Fig. 2)。与超导相关的新奇输运行为的物理机制探索是物理学界公认的难题, 单质作为物质世界的基本构成单元,具有最简单的化学组成,当前的研究为学界更深入地理解这些复杂 物理现象的本质提供了最简单干净的平台。



图 1 单质钛在超高压、强磁场下电阻随温度的变化曲线(a)和 Arrhenius 图(b)。



图 2 单质硫在超高压、强磁场下电阻随温度的变化曲线。

关键词: 新奇输运行为, 反常金属态, 玻色绝缘体

专题代号: C

La3Ni2O7 超导电性的电子轨道依赖研究

吴为

中山大学物理学院

摘要:

在静水压或者外延压力下,La₃Ni₂O₇体材料或薄膜材料出现高温超导电性。一些理论认为, 在高压下La₃Ni₂O₇中Ni的dz²相关轨道上升到费米面活化,其强的层间磁关联为系统电子 提供配对胶水,而dz²与dx²-y²的杂化使得电子配对实现相位相干,从而超导。但也有理论 认为,dz²无需金属化,dx²-y²轨道通过与dz²洪特耦合,或者其自身的强关联效应即可实 现超导。在最近的常压下La₃Ni₂O₇超导薄膜实验里,不同实验组结果也出现了dz²是否金 属化的分歧。在本工作中,我们运用动力学平均场理论研究双层两轨道Hubbard-Kanamori 模型中的超导电性。我们重点讨论dz²在费米面或者不在费米面时,系统的超导电性。运 用第一性原理计算,我们也将讨论SrLaAlO4衬底上La₃Ni₂O₇薄膜在外延压力下的电子轨道 性质。

新型锂基/铝基电子化合物超导材料的理论设计

张守涛

东北师范大学物理学院 Email: zhangst966@nenu.edu.cn

摘要:研发具有高超导临界温度(*T_c*)的新型超导材料一直备受凝聚态物理和材料科学领域的极大关注。 作为超导体家族的新成员,具有间隙阴离子电子的电子化合物超导体近年来引起了学术界广泛的研究兴 趣。本文利用 CALYPSO 结构预测方法结合第一性原理计算针对高压下富锂锗化物和铝硼化合物进行了 全面研究,以设计具有非凡物理特性的新型 Li-Ge 和 Al-B 电子化合物。确定了包括 Li₅Ge、Li₆Ge、Li₇Ge、 Li₈Ge 和 Li₁₀Ge 在内的几种致密金属化合物。其中,Li₅Ge 经历了从正交 *Cmcm* 结构到三斜 *C*2/*c* 结构的 相变,同时伴随从连通的一维到零维电子化合物态的演变。并且锂含量最高的 Li₁₀Ge 不仅具有不同寻 常的零维和一维间隙电子的共存态,而且在 50 GPa 以下拥有最高超导临界温度(*T_c* = 8.5 K)。同时理 论预言出兼具独特零维间隙电子态与超导性能的铝基电子化合物 Al₃B₂(*T_c* = 5.6 K @1 atm)。此外, 针对设计的非常规计量比 AlB₄,通过电子掺杂的策略有效优化其超导温度(*T_c* = 28.7 K @1 atm),致 使其超导温度堪比 MgB₂,为设计和合成新型多功能金属硼化物材料指明了全新方向。



图 1 压力诱导的锂锗/铝硼二元化合物超导体

关键词: 锂基电子化合物超导体; 铝基电子化合物超导材料; 结构预测; 第一性原理计算 参考文献

- 1. Phys. Rev. Lett. 122, 097002 (2019)
- 2. Chem. Rev. 121, 3121 (2021)
- 3. Phys. Rev. Lett. 127, 157002 (2021)
- 4. Phys. Rev. Lett. 129, 246403 (2022)
- 5. Phys. Rev. B, 110, 144523 (2024)
- 6. Phys. Rev. B, 111, 184508 (2025)

专题代号: C

高压下氢基超导体的理论设计

姜博文,张培育, 钟鑫, 刘寒雨

吉林大学 物理学院 物质模拟方法与软件教育部重点实验室

Email: zx777@jlu.edu.cn

摘要:

近年来,高压下氢基高温超导体的研究取得了系列突破性进展。人们先后发现了两类氢基高温超导体:第一类是以 H₃S 为代表的共价型氢基超导体;第二类是以 CaH₆,YH₉和 LaH₁₀为代表的具有氢笼 合物结构的离子型氢基高温超导体,这些研究工作使得超导体的超导温度的最高记录不断被刷新,其中 LaH₁₀超导温度达到创纪录的 250K。CaH₆与 YH₉和 LaH₁₀在晶体结构上的主要区别在于构成氢笼子的 氢原子数目从 24 增加为 29 和 32。沿着 CaH₆→YH₉→LaH₁₀序列来看,随着氢笼子的增大,构成笼子的 氢原子数目增加,氢化物中的氢含量逐渐增加,氢基超导体的超导温度 *T*。也沿着 215K→240K→250 K 逐渐增加。为了延续笼合物结构单元的基因,探索具有更大氢笼子的氢化物,我们在超高压条件下设计 出了一系列具有氢笼合物结构(H₃₆)的 MH₁₈新型氢基超导体(如,ThH₁₈和 CeH₁₈),最高理论超导温 度达 330K,这也是目前理论上提出的含氢量最高的氢基超导体,是室温超导体的可能候选体系,有待 后续实验验证,相关工作发表在 J. Am. Chem. Soc.,144,13394 (2022)。

同时,为了优化超导体的性质(如提升 T。和降低合成压强等),我们通过数据驱动等机器学习方法, 引入两种非氢元素,以实现对氢基笼合物体系的协同调控。计算结果表明:在 300 GPa 下,有 48 个动 力学稳定的超导结构,其中有 2 个结构兼备热力学稳定性;在众多稳的结构中,超导温度超过 250 K 的 结构有 11 个。相关工作发表在 Phys. Rev. B 111,054505 (2025),为探索更接近实用化条件的超导材料体 系提供了新的突破方向。

关键词: 高压强; 氢基超导体; 室温超导体; 笼合物; 第一性原理计算

201
非笼型氢化物高温超导体的理论设计

崔文文

江苏师范大学

wenwencui@jsnu.edu.cn

近年来, 氢笼基化合物超导体因其较高的超导转变温成为是研究热点, 但极高的合成压强(>150 GPa)大幅增加实验合成的难度。针对这一问题, 我们在稀土氢化物体系中, 引入轻元素 B/Be 与氢结合形成 B/BeH_x分子, 有效降低外部稳定压强, 从而设计出一系列可在较低压强下具有高临界温度的非笼型氢化物超导体 AcBeH₈、AcBH₇、Th₂BH₁₅等其*T*_c分别达180 K(10 GPa)、122 K(70 GPa)和 102 K(120 GPa),这一研究为中等压强下三元氢化物高温超导体的实验合成提供了理论支撑。此外, 我们还发现了高压下氢的多样性构型对超导性能的影响, 如在 HfH₉ 中发现了一种由氢纳米管插入 Hf-H 框架组成的独特结构, 其*T*_c在 200 GPa 下可达 110 K;在 H₂He中,氢原子表现出奇特的石墨烯构型,通过电子掺杂,*T*_c可提升至 201 K等。这些奇特氢构型在氢化物超导中起到了主导作用,为设计高温超导体

0

磁性半导体 Eu (Te, Se)₂的高压输运和结构研究

王铂森

中国科学院物理研究所,北京 100190 Email: <u>bswang@iphy.ac.cn</u>

摘要:

含有 Eu²⁺/Eu³⁺离子的化合物是探索磁性超导态,拓扑磁性相变和磁性功能材料的重要载体。 本报告将介绍综合极端条件实验装置的六面砧实验站以及两类反铁磁半导体材料的高压调 控研究,包括发现 EuTe2 中奇异超导态与共存反铁磁序的同步增强现象[1];干净极限的 EuSe2 中破纪录的巨磁电阻和角磁阻效应[2];高压手段有效调控 EuSe2 的巨磁电阻[3]等。

关键词:静水压,磁性超导,共存反铁磁相,巨磁电阻和角磁阻

参考文献

- [1] P. T. Yang, et al, Nature Communications 13, 2975 (2022).
- [2] Q. X. Dong, et al, arXiv:2412.17594 (2024) (submitted).
- [3] Q. X. Dong, et al, (submitted)

Interplay of superconductivity and charge-density-wave in

kagome metal CsV₃Sb₅ under pressure

Ge Ye¹, Dongting Zhang¹, Lichang Yin¹, Chufan Chen¹, Xiaofeng Xu²,

Xin Lu^{1*}

1 Center for Correlated Matter, School of Physics, Zhejiang University, Hangzhou, China

2 Department of Applied Physics, Zhejiang University of Technology, Hangzhou, China

3 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China e-mail:xinluphy@zju.edu.cn

Kagome superconductor CsV₃Sb₅ has attracted much attention due to the intriguing competitions between charge-density-wave (CDW), superconductivity and nontrivial topology. In this talk, we will demonstrate that CsV₃Sb₅ under pressure P<2.5 GPa shows a multi-gap s-wave superconductivity with three distinct superconducting gaps observed in the soft point-contact spectroscopy (PCS) studies under pressure. The smaller gaps Δ_1 and Δ_2 are robust under pressure, while the largest SC gap Δ_3 can only be observed in the pressure range of 0.7 -2.0 GPa with soft-PCS along the c-axis direction, suggesting a complex relationship between CDW and SC.

Meanwhile, the electrical resistance measurements on $C_sV_3Sb_5$ thin flakes with thickness ~ 60 nm under pressure were carried out to compare their pressure phase diagram with the bulk form. While the CDW transition vanishes at P=1.83 GPa similar to the bulk, the superconducting Tc shows an initial decrease and consequent increase up to its maximum ~8.03 K, in sharp contrast with the M-shaped double-domes in the bulk.

[1] D. T. Zhang, C. F. Chen, L. C. Yin, et al., <u>SCIENCE CHINA Physics, Mechanics & Astronomy</u> 66, 227411 (2023);

[2] G. Ye, M. Xie, C. F. Chen, et al., PRB 109, 054501 (2024).

Pr₄Ni₃O₁₀单晶的压力诱导超导及电子结构研究

裴翠颖、齐彦鹏*

上海科技大学物质科学与技术学院 Email: qiyp@shanghaitech.edu.cn

摘要:

自 2019 年在无限层结构的镍酸盐薄膜中发现超导电性以来¹,镍基超导体成为超导领域的研究焦 点。2023 年,双层镍氧层钙钛矿材料 La₃Ni₂O₇在高压下展现出高达 80 K 的高温超导特征,引发了广 泛关注与研究热潮²。此后,三层镍氧层钙钛矿 La₄Ni₃O₁₀单晶在高压下也呈现出接近 30 K 的超导转变, 进一步丰富了镍基超导体家族^{3,4}。 Pr 掺杂的 La₂PrNi₂O₇多晶不仅有效提高了超导转变温度,还显著 提高了超导相的纯度⁵,有利于进一步优化镍基超导材料的设计与合成,极大地推动镍基高温超导体的 研究进程。

本次报告将系统梳理镍基超导从发现至今的发展脉络, 剖析当前面临的问题与挑战, 介绍对 Pr4Ni3O10单晶最新的研究成果。我们通过高氧压下的光学浮区炉成功生长出高质量单晶。高压电输运测 量表明, Pr4Ni3O10在 10 GPa 进入超导态, 最高超导转变温度达 39 K 且未饱和。高压下的直流磁化率 测量证实了材料的体超导性。原位高压低温同步辐射 XRD 测量揭示了 Pr4Ni3O10从单斜晶系 P21/a 到 四方晶系 I4/mmm 的结构转变。理论计算显示, Pr4Ni3O10高压相的电子结构在费米能级附近由特定轨 道主导,呈现出与 La4Ni3O10不同但与双层镍酸盐 La3Ni2O7相似的特征。这些发现为理解镍基超导体的 晶体和电子结构共性, 以及高温超导机制提供了关键信息。

关键词: 镍基超导体,高压,超导,相变 参考文献

1 Li, D. et al. Superconductivity in an infinite-layer nickelate. Nature 572, 624-627 (2019).

2 Sun, H. *et al.* Signatures of superconductivity near 80 K in a nickelate under high pressure. *Nature* **621**, 493-498 (2023).

3 Zhang, M. et al. Superconductivity in trilayer nickelate La4Ni₃O₁₀ under pressure. Phys. Rev. X 15, 021005 (2025).

- 4 Zhu, Y. *et al.* Superconductivity in pressurized trilayer La₄Ni₃O_{10-δ} single crystals. *Nature* **631**, 531-536 (2024).
- 5 Wang, N. *et al.* Bulk high-temperature superconductivity in pressurized tetragonal La₂PrNi₂O₇. *Nature* **634**, 579-584 (2024).

Phases and Phase transitions in pressurized SrCu₂(BO₃)₂

<u>郭静</u>,王鹏玉,黄程,陈欣甜,赵金瑜,周亚洲,蔡树,孟子杨,孙力玲 中国科学院物理研究所 email: jguo@iphy.ac.cn

摘要:去禁闭量子临界点(DQCP)超越了LGW 相变理论框架,体现了分数化、物质场和规范场耦合、 演生连续对称性等量子物质科学新范式的基本思路^{1,2}。对于DQCP 的理解引起了研究人员广泛的关注。 阻挫磁体材料 SrCu₂(BO₃)2被认为是研究 DQCP 是否存在的最理想的材料。在这种材料中,Cu²⁺离子之 间存在最近邻相互作用和次近邻相互作用,在常压下处于二聚体态。实验和理论研究发现,在压力下, 最近邻和次近邻相互作用的相对大小可以发生变化,使得二聚体态转变为四聚体态,即晶格中四个最近 邻的自旋形成,从而进入反铁磁态。四聚体态打破晶格平移与转动对称性,反铁磁态破坏了自旋旋转对 称性。如果这两种具有不同对称性自发破缺相在一个连续相变点相遇,这个点就是 DQCP。我们之前利 用高压下比热测量的方法对该材料进行了系统的研究,首次在实验上完整地获得了该系统随压力从二聚 体态(DS)到四聚体态(PS)再到反铁磁态(AF)演化的基态相图,填补了20多年来对该材料研究 的空白³。但由于实验条件的限制,从 PS 态到 AFM 态的演化过程尚不清楚。最近,我们利用新搭建的 设备对该压力区间(2.4-3.1GPa)进行了更为系统的研究。我们发现 PS-AF 的相变是明确的一级相变。 我们的结果澄清了关于这一关键问题的长达二十年的争论,并与最近的理论共识相吻合,即在典型晶格 模型中先前预测的 DQCP 实际上是一阶相变⁴。有趣的是,我们还发现 PS 和 AF 相的转变温度在相同 的压力-温度点相遇,这意味着与铁基超导体和重费米子化合物中观察到的双临界点类似,这也是首次 在阻挫磁体材料中发现压力诱导的双临界点。

关键词: 高压, 比热, 阻挫磁体材料, 量子相变

参考文献:

1. T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M. P. Fisher, Science 303, 1490 (2004).

2. T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B 70, 144407 (2004).

3. J. Guo, G. Y. Sun, B. W. Zhao, L. Wang, W. S. Hong, V. A. Sidorov, N. Ma, Q. Wu, S. L. Li, Z. Y. Meng, A. W. Sandvik, and L. L. Sun, Phys. Rev. Lett. 124, 206602 (2020).

4. J. Guo, P. Y. Wang, C. Huang, B. B. Chen, W. S. Hong, S. Cai, J. Y. Zhao, J. Y. Han, X. T. Chen, Y. Z. Zhou, S. L. Li, Q. Wu, Z. Y. Meng, and L. L. Sun, Communications Physics (2025).

压力诱导的层状材料 RbMgBi 超导电性与电子结构重构

陈欣甜*、陈文轩*、段德芳*、应天平‡、郭静§

中国科学院物理研究所、吉林大学物理学院

Email: jguo@iphy.ac.cn

摘要:

铜基、铁基和镍基等高温超导体的发现宣告了在特定的结构中寻找新的超导体的可行性。在这一过程中,超导"基因"的概念也随之提出,寻找新的超导"基因"成为了发现新型超导体的重要途径¹。本工作报道了在常压下的层状非金属材料 RbMgBi 化合物中发现压力诱导超导转变的现象²。当压力达到约 4.5 GPa 时,该材料首先经历了绝缘体-金属转变,并同时伴随首次超导相变 (SC-I)。继续加压,在 10.4 GPa 附近,第二个超导相(SC-II)开始显现。高压 X 射线衍射表明在 5.5 GPa 附近发生了明显的 c 轴坍缩,以及从四方相 (*P4/nmm*)向正交相 (*Cmcm*)的结构相变,证实了层间距及层间耦合对诱导超导电性的关键作用。高压霍尔测量揭示了临界压力下显著的载流子演化过程,结合第一性原理计算揭示了其压力诱导的电子态重构——从低压下单带相转变为具有更高费米速度和超流密度的多带相。RbMgBi 化合物是首次在 Mg-Bi 层状结构中发现的新型超导体,预示着一个新的超导"基因"的诞生。这些发现揭示了结构压缩、载流子动力学与超导电性之间的紧密关联,为压力调控超导电性提供了全新的认知,同时也为通过结构-电子耦合工程途径设计新型超导体指明了方向。



图 1 压力下 RbMgBi 的超导相图与霍尔系数。

关键词: 高压, 超导电性, 超导基因, 第一性原理计算 参考文献

1. J. Hu, Science Bulletin 61, 561 (2016).

2. C. Le, S. Qin, X. Wu, X. Dai, P. Fu, C. Fang, and J. Hu, Physical Review B 96, 115121 (2017).

Pressure-Induced Superconducting Phases and Electronic Reconstruction in Layered RbMgBi

Xintian Chen^{1,2*}, Wenxuan Chen^{1,4*}, Yuxin Yang^{1,2*}, Yazhou Zhou¹, Cheng Huang⁶, Pengyu Wang^{1,2}, Yangfan Gao^{1,2}, Defang Duan^{4†}, Shu Cai³, Jinyu Zhao³, Jinyu Han^{1,2}, Ke Yang⁵, Aiguo Li⁵, Sheng Jiang⁵, Qi Wu¹, Tianping Ying^{1,2‡}, Jing Guo^{1,2§} and Liling Sun^{1,2,3}

¹Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China
²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China
³Center for High Pressure Science & Technology Advanced Research, Beijing 100094, China
⁴Key Laboratory of Material Simulation Methods & Software of Ministry of Education and State Key Laboratory of Superhard Materials, College of physics, Jilin University, 130012, Changchun, China
⁵Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, No.239 Zhangheng Road, Shanghai 201204, China
⁶Department of Physics and HK Institute of Quantum Science & Technology, The University of

Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong SAR, China

ABSTRACT. We report the discovery of pressure-induced superconductivity transitions in RbMgBi, a nonmetallic layered compound under ambient conditions.Under pressure, RbMgBi first undergoes an insulator-to-metal transition at ~ 4.5 GPa, coinciding with the emergence of a superconducting phase (SC-I). A second superconducting phase (SC-II) appears near 10.4 GPa, with both phases coexisting until SC-II becomes dominant above ~14.3 GPa. High-pressure X-ray diffraction reveals a substantial c-axis contraction and a structural transition from a tetragonal P4/nmm to an orthorhombic Cmcm phase near 5.5 GPa, underscoring the role of interlayer spacing in enabling superconductivity. Hall measurements show marked carrier evolution at the critical pressures, while first-principles calculations indicate a pressure-driven electronic reconstruction—from a single-band regime to a multiband state with enhanced Fermi velocity and superfluid density. Our results demonstrate a strong interplay between structural compression, carrier dynamics, and superconducting behavior, offering new insight into pressure-tuned superconductivity and guiding principles for designing emergent superconductors via coupled structural-electronic engineering.

Substitution of Y, Ce, and Th for La in LaBeH₈ as a path towards

lower synthesis pressures of superconducting hydrides

Yuan Ma,¹ Jie Luo,¹ Sheng Meng², Xin Zhong,^{1,*} Guangtao Liu,^{1,*} Hanyu

Liu^{1, 3, *}, Yanming Ma^{1, 3}

¹Key Laboratory of Material Simulation Methods and Software of Ministry of Education and State Key Laboratory of Superhard Materials, College of Physics, Jilin University, Changchun 130012, China

²Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China ³International Center of Future Science, Jilin University, Changchun 130012, China

Abstract

Recent theory-guided discoveries of hydrides exhibiting high superconducting temperatures (T_c) exceeding 200 K above 150 GPa have sparked the enthusiasm for the pursuit of roomtemperature ambient-pressure superconductors. While efforts to increase the $T_{\rm e}$ s of these hydrides are underway, optimizing the demanding high-pressure synthesis conditions remains a challenge. Several studies suggested that a multi-elemental alloying strategy could be a feasible approach to tackle this formidable task. Here, we present an example using LaBeH₈ to establish several alloy hydrides via the substitution of La atoms with similar metal atoms, such as Y, Ce, and Th. Quasiquaternary alloy hydride (La, Y, Ce, Th)BeH₈ is computed to become thermodynamically stable at 70 GPa and a typically realistic temperature of ~2000 K for synthesizing high-T_c hydrides, compared with the calculated results showing thermodynamic instability above 300 GPa without considering entropy. Our in-depth analysis revealed that not only entropy plays a crucial role in stabilizing alloy hydrides at moderate pressures and high temperatures, but also the energy contribution from vibrational entropy is much more significant than configurational entropy as unexpected, where configurational entropy has long been believed to play a key role in the stability of multi-elemental alloy. Furthermore, extensive electron-phonon simulations indicate that the estimated T_c of (La, Y, Ce, Th)BeH₈ could reach near ~100 K at 70 GPa. The present work offers a fresh perspective on the design and realization of high- T_c multi-elemental alloy hydrides towards near ambient pressure.

利用高压超快光谱揭示 La3Ni2O7 中类密度波相的演化

孟养浩^{1,2},杨易^{1,3},孙化蕾⁴,张飒飒^{3,5}, 雒建林^{1,2},陈刘城¹,马肖莉¹,

王猛⁶,洪芳^{1,2,7},汪信波^{1,2},于晓辉^{1,2,7}

1. 中国科学院物理研究所

2. 中国科学院大学物理学院

3. 山东大学激光与红外系统教育部重点实验室

4. 中山大学理学院

5. 山东大学信息与工程学院

6. 中山大学物理学院

7. 松山湖实验室

mengyh16@iphy.ac.cn

摘要: 高温超导体 La₃ Ni₂ O₇ 中可能存在的自旋密度波/电荷密度波被认为与超导电性相关,研究 他们的演化对于理解其超导机制有重要意义。然而由于受到高压下非静水压条件和其样品的不均匀性的 影响,通过常规高压手段研究他们的在高压下的演化存在一定困难。本研究利用超快光学泵浦-探测光 谱技术,探测了双层镍氧化物 La₃ Ni₂ O₇ 单晶中的准粒子动力学。观察到了低压下的自旋密度波 随着压力增加被显著抑制,并在 26 GPa 附近完全消失。此外我们还在 29.4 GPa 以上的压力观察到了 一个新的类似密度波的序的出现,其转变温度约为 135 K,这可能与预测的电荷密度波序有关。我们的 研究为高压下 La₃ Ni₂ O₇ 密度波演化提供了实验证据,为理解 La₃ Ni₂ O₇ 中密度波序与超导电 性之间的关联提供了见解。

关键词: La3 Ni2 O7 ; 超快光谱; 自旋密度波; 电荷密度波; 超导。

Sn₄P₃中大的负面压缩效应和超导电性增强行为

王琦、吴珏霏、王义炎、郑藩邦、裴翠颖、赵毅、曹魏征、陈宇林、夏天龙、

颜世超、齐彦鹏

上海科技大学物质科学与技术学院

Email: wangqi5@shanghaitech.edu.cn

摘要:

具有奇异的压缩-膨胀行为的负压缩效应引起了广泛的研究兴趣。这里,我们在层状超导体 Sn₄P₃ 中发现一个巨大的负面压缩效应 NAC (-157.6 TPa⁻¹),它是由压力诱导的等结构相变驱动的。Sn₄P₃是第 一个具有 NAC 行为的本征超导体。此外,超导转变温度 *T*。在相变压力以上显著增强,最大值达到~7.85 K。在高压等结构相变中二聚体 P1-P3 的形成提高了费米能级附近 P 原子的态密度,这对 *T*。的增加至关 重要。我们的工作不仅丰富了 NAC 材料家族,而且有助于理解 NAC 对超导性能的影响。

关键词: 高压, 负面压缩, 超导, 结构相变 参考文献

 Q. Wang et al., Giant negative area compressibility in layered Sn₄P₃ with enhanced superconductivity. Cell Reports Physical Science 6, 102450 (2025).

CuTe 中压力诱导的电荷密度波态与各向异性超导电性

王舒阳^{1*}、陈绪亮¹、郝宁¹、杨昭荣¹ 1 中国科学院强磁场科学中心,合肥 230031 Email: sywang@hmfl.ac.cn

摘要:超导与电荷密度波(CDW)之间的关联一直是凝聚态物理研究的热点。最近,新发现的层状准一维 CDW 材料 CuTe 在多个方面表现出它非常符合 Peierls 转变这个标准模型,因此作为一个理想的研究 CDW 的平台受到广泛关注。我们对 CuTe 进行了压力调控研究,结合高压下极低温各向异性电输运、变温高压拉曼光谱以及理论计算,细致地描绘了该材料在高压下的相图。我们证明压力可以有效抑制初始的 CDW (CDW1)态,在约 6.5 GPa 时CDW1 态转变为新的 CDW (CDW2)态。计算表明,CDW1 的驱动力来自于费米面嵌套效应,这与之前的报道相同;而 CDW2 的驱动力可能来自电子关联作用。在电输运测量中发现,在 5.4 GPa-6.4 GPa 间形成一个各向异性的超导态,即当电流分别沿晶体 *a* 和 *b* 轴施加时, b 轴的超导转变更加陡峭且零电阻温度更高。而当 CuTe 进入 CDW2 态后,不同方向的超导电性趋于一致。我们从热力学、局部超导配对和强 CDW 波动等方面进行了讨论,认为面内各向异性超导与准一维 CDW 在压力下互锁的现象都源于其面内 Te 原子的准一维链状排列。上述实验揭示了高压下 CuTe 中的新奇电子关联效应以及丰富物理现象,并为理解超导超导态与 CDW 之间复杂的相互机制提供了新平台。



基于 NV 色心的镍氧化物高压超导研究

<u>文俊彦</u>[†]、徐跃[†]、王罡[†]、何泽旭、陈旸、王宁宁、芦腾龙、马晓莉、金峰、

陈刘城、刘淼、范经纬、刘晓兵、潘新宇、刘刚钦*、程金光*、于晓辉*

中国科学院大学物理研究所 Email: <u>gqliu@iphy.ac.cn</u>; jgcheng@iphy.ac.cn; yuxh@iphy.ac.cn

摘要:

近年来,高压镍酸盐超导体的研究因其潜在的高温超导特性备受关注,但受限于超导体积分数低及高压下磁性测量技术的不足,双层镍酸盐 La₃Ni₂O₇₋₈中迈斯纳效应的直接证据尚未明确。本研究利用金刚石氮空位(NV)色心作为高压原位量子传感器,在高压条件下对多晶 La₃Ni₂O₇₋₈及 La₂PrNi₂O₇的迈斯纳效应进行了探测。实验发现,两种材料在场冷却(FC)过程中均表现出显著的排出磁力线的现象,证实了超导迈斯纳效应的存在。结合拉曼光谱与 NV 磁成像分析,非超导区域可能存在结构转变不完全现象。本工作为双层镍酸盐的高温超导提供了关键实验证据,并展示了 NV 色心在高压原位研究中的独特优势。



20GPa下 La₂PrNi₂O₇的迈斯纳效应

关键词: 金刚石氮空位色心 镍氧化物高温超导体 迈斯纳效应

参考文献

1. Sun, H. et al. Signatures of superconductivity near 80 K in a nickelate under high pressure. Nature 621, 493-498 (2023).

2. Hou, J. *et al.* Emergence of High-Temperature Superconducting Phase in Pressurized La₃Ni₂O₇ Crystals. *Chin. Phys Lett.* **40**, 117302 (2023).

3. Zhu, Y. *et al.* Superconductivity in pressurized trilayer La₄Ni₃O_{10- δ} single crystals. *Nature* **631**, 531-536 (2024).

4. Wang, N. N. *et al.* Pressure-induced monotonic enhancement of T_c to over 30 K in superconducting $Pr_{0.82}Sr_{0.18}NiO_2$ thin films. *Nat. Commun.* **13**, 4367 (2022).

压力诱导的类 CDW 转变

应剑俊

中国科学技术大学物理学院 Email: yingjj@ustc.edu.cn

摘要:

压力一般情况下会压制电荷密度波转变(CDW),我们在几个体系中发现了反常的压力诱导的类 CDW 转变。 我们首先对 FeGe 进行了高压下的电输运测量以及 XRD 测量,发现其 CDW 转变温度随压力增大而提高, 这与基于 Ge1 位点二聚化的 DFT 计算得出的 CDW 能量随压力增加而降低一致。高压 XRD 实验则发现在 20 GPa 以上出现了新的衍射峰,它可以用 DFT 计算得到的亚稳态 √3× √3×6 CDW 构型很好的拟合,表 明 FeGe 中的 CDW 是由 Ge1 二聚化的磁能节省和结构畸变导致体系能量损耗之间的微妙平衡所驱动的。 随后,我们对近期发现的Cu₄As₃型 CDW 超导材料Th₂Cu₄As₅ 进行高压研究,发现其超导转变温度随 着压力下 CDW 的压制而上升;在 CDW 完全消失时达到最大值 6.2 K; CDW 消失后缓慢降低,呈现出 典型的圆顶行为。更有趣的是,当继续加压超过 8 GPa 时,超导转变突然消失伴随样品电阻率和霍尔电 阻率等电输运性质的剧烈变化。单晶 X 射线衍射图像表明 8 GPa 以上样品形成 2×2×5 超晶格。这一超 晶格可能是与 Cu₄As₃超导层相关的不寻常的 CDW 态,与超导的相互竞争关系导致超导的消失。

静水压诱导的 Bi2Se3拓扑超导及应用拓展

<u>郑群飞</u>1,赵凌霄²,朱金龙^{1,2,3*}

1) 物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心,南方科技大学,

深圳 518055

2) 粤港澳大湾区(广东)量子科学中心, 深圳 518045

3) 新材料重大科学设施研院,南方科技大学,深圳 518055

Email: zhujl@sustech.edu.cn

摘要:

压力及其梯度环境在物态调控,特别是对有序无序以及局域对称性敏感的物性发挥着关键影响。受时间反演对称性保护的表面狄拉克态及拓扑超导即为其中之一。高压下 Bi₂Se₃ 在单斜相 (如 C2/m) 出现超导,但常压菱方相 (R-3m) 始终未见超导^[1-3]。争议在于压力如何通过保护拓扑表面态或触发电子 拓扑转变 (ETT) 调控超导。同属层状拓扑绝缘体 Bi₂Te₃在非静水压下,3.2 GPa 时菱方相即出现超导(无相变);而静水压下需 7 GPa 以上,且与菱方→单斜相变同步。此差异源于非静水压的剪切应力诱导局 部晶格畸变/结构转变,从而提前实现超导;静水压的均匀性则抑制此效应,从而使超导严格依赖单斜 相整体重构^[4-6]。

本研究结合金刚石对顶砧(DAC)与二维转移技术,系统对比准静水压(Daphne 7373 油)与非静水压(NaCl)条件、层数依赖下 BiaSes的高压行为。实验结果表明,准静水压下薄层样品(~56 nm)在 2.4 GPa 即出现超导转变(*T_c^{onset}=8.1* K),而块体样品的超导相则需在更高压力(4.1 GPa)下激活 (*T_c^{onset}=5.8* K)。值得注意的是,超导相与材料*R-3m* 相中的拓扑表面态(狄拉克锥)在此压力区间内 共存,表明高压下拓扑态与超导态可能存在协同作用。进一步分析发现,薄层样品中超导相提前出现且 临界温度升高的现象可能与其独特的低维特性相关:一方面,层数减少导致压力梯度更显著集中于面内 晶格,引发面内键长压缩增强,具体表现为拉曼光谱中*A*²_{1g}模的频率随压力变化速率在薄层中达 4.9 cm⁻¹/GPa,显著高于块体样品的 2.9 cm⁻¹/GPa。同步辐射 X 射线衍射与拉曼光谱证实,超导起始压力 (2.4-4.1 GPa)与 ETT 临界点(3.0-4.6 GPa)一致,表现为晶胞体积突变及声子模式斜率转折,反映 费米面拓扑重构驱动超导配对。Ginzburg-Landau 理论分析显示,薄层样品零温上临界场μ₀H_{c2}及相干长 度与拓扑超导体 Cu_xBiaSea高度可比⁽⁷⁾,暗示强自旋轨道耦合诱导的非常规配对机制。在薄膜 BiaSea材料 生长中可通过~0.6%的晶格失配来制备常压拓扑超导,相较于化学掺杂的 Cu_xBiaSea(易受载流子局域 化和界面无序影响),应变工程策略避免了化学异质性,同时保留了拓扑表面态的完整性,为常压拓扑 超导提供了更纯净的平台。实验验证表明,非静水压条件(如 NaCl 传压介质)下超导仅在压力>11 GPa, 且 *T*。显著滞后,归因于剪切应力诱导晶格无序化破坏拓扑表面态与体态杂化。

本工作首次揭示静水压下 Bi2Se3菱方相中超导与拓扑表面态协同共存,结合同步辐射 XRD 与拉曼 光谱数据,证明压力均匀性通过抑制晶格畸变、保护拓扑序完整性显著降低超导阈值。该发现为理解拓 扑-超导耦合机制提供了基于压力梯度调控的新策略,并为通过应变工程(晶格失配诱导)或压力淬灭 技术(亚稳相保留)实现常压拓扑超导态奠定了实验基础。

Pressure tuning of superconductivity in natural bulk van der Waals heterostructure

Yonghui Zhou^{1*}, Shaopeng Wang¹, Zhaorong Yang¹, Jian Zhou²

¹Anhui Key Laboratory of Low-energy Quantum Materials and Devices, High Magnetic Field Laboratory, HFIPS, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China

²National Laboratory of Solid State Microstructures and Department of Materials Science and

Engineering, Nanjing University, Nanjing 210093, China *Email: yhzhou@hmfl.ac.cn

Engineering van der Waals heterostructures (vdWHs) via pressure in a continuous manner not only allows for generation of new states of matter, but also provides a distinctive platform to study the interplay between competing electronic orders in separated layers. As a natural bulk vdWHs, 6R-TaS₂ consists of alternate stacking 1T- and 1H-TaS₂ monolayers, incorporates charge-density-wave (CDW) order and superconductivity in distinct monolayers, and is equivalent to a stack of superconductor-insulator-superconductor Josephson junctions (see Fig. 1). By compressing 6R-TaS₂, we showed that the superconducting T_c exhibits a nonmonotonic behavior: initial increases, then plateaus, then depresses, and finally resurges at higher pressures. Detailed analyses indicated that the nonmonotonic behavior can be accounted for in a scenario of pressure-tuned Josephson coupling associated with the evolving of the 1T-layer: first from insulator to metal both with static CDW order, then to metal with fluctuating CDW order, followed by finally becoming superconducting. Our findings of the CDW-fluctuation-induced suppressing of superconductivity in 6R-TaS₂ may shed light on studying the interplay between competing electronic orders in the vdWHs.



Figure 1. Scenario of pressure-tuned Josephson coupling associated with the evolving of 1T-layer TaS₂ Keywords: Superconductivity, Charge density wave, Bulk van der Waals heterostructures (vdWHs), Pressure Reference

1. Shaopeng Wang et al., Physical Review Letters 133, 056001 (2024).

本研究聚焦于中/高熵合金(MEAs/HEAs)这一新兴材料体系。这类材料由多种主要元素以等原子比或近等原子比组成,其独特的构型熵效应能显著降低体系的吉布斯自由能,从而在简单晶格结构中实现多组分相的热力学稳定。正是这种超稳定特性使得 MEAs/HEAs 展现出非凡的结构刚性——即使在超高压条件下,其晶体结构和电子结构都表现出极强的抗调谐能力。相比之下,大多数传统材料在 100 GPa 量级的压力下通常会经历多达 5 次相变。尽管已有研究在部分 MEAs/HEAs 中观测到超导现象,但这些体系的超导转变温度(Tc)普遍表现出很强的鲁棒性,通过压力调控很难突破 10 K 的瓶颈。

在本工作中,我们系统研究了 TaNbHfZr 中熵合金在极端高压条件下的结构演变和电子性能。与绝大多数 MEAs/HEAs 不同,该体系的超导特性展现出显著的压力响应性:在 71.6 GPa 压力下获得 15.3 K 的最大 Tc 值,这一数值几乎是常压条件下的两倍。据我们所知,这是目前所有报道的 MEAs/HEAs 体系中的最高记录。更引人注目的是,TaNbHfZr 的超导转变温度随压力变化呈现出典型的穹顶型曲线,其超导相区可延伸至 157.2 GPa,这一行为特征与非常规的铜基或铁基超导体高度相似,在 MEAs/HEAs 体系中尚属首次发现。

通过第一性原理计算,我们揭示了这种特殊超导行为的微观机制。研究发现,压力同时 诱导了两个相互竞争的效应:一方面显著提升了对数平均特征声子频率ωlog,另一方面又抑 制了电子-声子耦合常数λ。这两个参数的协同竞争最终形成了独特的超导穹顶曲线。此外, 高压同步辐射 X 射线衍射实验明确证实,即使在 50.5 GPa 的超高压条件下(此时材料体积 被压缩约 22.8%),TaNbHfZr 仍保持完好的晶态结构,未出现非晶化或结构相变。通过三 阶 Birch-Murnaghan 状态方程拟合得到的体积模量 B0 约为 111.3 GPa,与金属 Zr 或 Hf 相当。 然而值得注意的是,上述这些纯金属或其合金通常在相对较低的压力条件下就会发生多次结 构相变,这进一步凸显了TaNbHfZr 中熵合金卓越的结构稳定性。

我们的研究重点具体如下:

1. TaNbHfZr的 Tc是 MEAs/HEAs 的最高值。

2. 通过提高ωlog,同时抑制λ,可以获得 MEAs/HEAs 中罕见的穹顶型超导。

3. 在 50.5 GPa 下,虽然体积被压缩了 22.8%,但 TaNbHfZr 没有发生相变,这表明 MEAs/HEAs 具有惊人的稳定性,这对工业和凝聚态物理的应用具有重要意义。

基于金刚石 Ⅳ 色心的高压超导磁探测

<u>陈吴昊</u>^{1*}、黄晓丽²、崔田³、朱金龙⁴、杨森⁵

1. 粤港澳大湾区(广东)量子科学中心

2. 吉林大学

3. 宁波大学
4. 南方科技大学

5. 香港科技大学

*Email: <u>chenwuhao@quantumsc.cn</u>

摘要:

近年来,金刚石氮空位(NV)色心因其在磁探测方面具有较高的灵敏度与空间分辨力,在高压科学研究领域展现出重要的的潜力。在高温超导研究方面,富氢化物传统超导体以及镍氧化物非传统超导体的发现均证明高压条件具有极大的促进作用。然而,在较高压力尤其是百万大气压力以上,传统磁测量方法无法对超导抗磁性、磁通钉扎效应等进行精密的测量。本人将简要介绍 NV 色心量子传感技术在高压下的应用,并围绕铈氢化物的超导研究展示其在高压磁测量方面具有的独特优势。

关键词: 金刚石对顶砧 NV 色心 高压超导 磁探测

参考文献:

- 1. Chen, W., et al. Phys. Rev. Lett. 127, 117001 (2021).
- 2. Bhattacharyya, P., Nature 627, 73-79 (2024).
- 3. Kin On Ho & Sen Yang, Nature 627, 45-46 (2024).

高压下的 ZrP2: 声子软化-硬化转变附近的超导电性

陈绪亮1、王舒阳1、安超2、周健3、杨昭荣1

¹中国科学院合肥物质科学研究院强磁场科学中心,安徽合肥,230031 ²安徽大学物质科学与信息技术研究院,安徽合肥,230026 ³南京大学现代工程与应用科学学院,江苏南京,210093 E-mail: xlchen@hmfl.ac.cn

自 1911 年发现超导电性以来,人们一直尝试探寻发现新超导体或具有更高转变温度(*T*_c)超导体的有效路径。在此过程中,大量研究表明超导常常临近晶格失稳,尽管到目前为止其背后机制仍不明确。 例如,软模声子和声子软化现象普遍存在于几乎所有高温超导体中,前者被认为与高温超导配对机制存 在密切关联;然而,高温超导相图中往往还存在许多竞争的量子序,不利于澄清二者之间的关联性。这 里,在结构相对简单的拓扑半金属材料 ZrP₂中,我们通过系统的高压室温同步辐射 XRD、高压变温 Raman 光谱和高压变温电输运实验测量并结合理论计算,发现了其高压下伴随声子软化-硬化转变出现 的超导电性(*T*_c~0.6 K; *P*_c~25 GPa)。同时,该声子软化-硬化转变可存在于 300K 到 10K 的巨大温度 范围,未发现明显的结构转变,但在 *P*_c 附近会伴随着晶格参数比的异常和载流子类型的转变。本结果 提供了一个很好的研究声子软化和超导相互关联的材料平台。



图 1 ZrP2 高压相图: 声子软化-硬化转变附近的超导电性

关键词: ZrP2, 高压, 声子软化, 超导电性

参考文献

1. Phys. Rev. B 111, 174510 (2025).

黑磷体系超导物态压力及层数依赖及演变

程文静、李辰恺、金美玲、朱金龙

物理系&量子功能材料全国重点实验室&广东省高等学校量子科学基础研究卓越中心, 南方科技大学,深圳 518055

2) 粤港澳大湾区(广东)量子科学中心, 深圳 518045

3) 新材料重大科学设施研院,南方科技大学,深圳 518055

Email: 12431024@ mail.sustech.edu.cn

摘要:

二维超导性因其奇特的量子现象而备受关注。层状材料的准二维特性为寻找二维超导提供了新平 台,特别是其可控的厚度更为我们精确的调控二维超导性提供可能。黑磷作为一种层状材料,具有层数 依赖的直接带隙和各向异性的皱褶结构,最近成为探索量子现象的独特平台。本工作中,我们系统研究 了体材料和少层(6-15 层) BP 中压力与厚度对超导特性的调控。首先,通过结合高压电输运测试和 Raman、XRD等结构表征技术,明确了体材料中高压下结构相变的边界,特别是在10 K 的低温下。同 时,我们发现黑磷在压力下的层间滑移带来的能带重构或较强的电声耦合,是黑磷发生金属化或超导的 重要原因。在体材料中,超导相被认为出现在发生层间滑移后的 BP 相和两个高压相中。在15 层样品 中层间滑移导致了绝缘体金属转变,而6 层样品在层间滑移后仍然表现为绝缘体被认为是6 层本身较大 的带隙导致的。在结构相变之后,15 层和6 层样品均出现超导特性。在对超导维度的研究中,上临界 常的角度依赖关系和 I-V 特性曲线均表明块状材料在压力下具有伴随结构相变的 3D-2D-3D 超导维度转 变,A7 相的二维特性被认为是由于形成了弱相互作用的纳米片。而少层样品则一直表现为二维超导。 此外,随着厚度的减小,上临界场显著增加,特别是在6 层时,面内上临界常超过了泡利极限,这是由 于自旋-轨道散射增强所致。



图 1 (a)压力下黑磷的结构和电子结构相变过程。(b)块体黑磷晶体结构演化示意图。(c)少层黑磷面内、

面外各向异性上临界场。

关键词: 高压、黑磷、超导

笼目超导体 CsV₃Sb₅中超导配对对称性随压力的演化

冯旭阳^{1,2}、罗军¹、杨杰¹、周睿¹

中国科学院物理研究所,北京凝聚态物理国家实验室,北京 100190
²中国科学院大学物理科学学院,北京 100049

Email: xyfeng@iphy.ac.cn

摘要:

kagome 晶格是一种由共角连接三角形构成的周期性结构,该体系具有奇异的电子结构,包括狄拉克费米子、平带、范霍夫奇点和拓扑表面态等,能够为几何阻挫、强电子关联效应和拓扑量子态等物理性质提供一个独特的研究平台。理论上,非常规超导电性可在 Kagome 体系中出现,但实验中发现的kagome 结构超导体大多具有传统超导特性。近期,一类新的 V 基准二维 Kagome 超导体系: AV₃Sb₅ (A = K, Rb, Cs),因其丰富的物理吸引了大量研究。特别是 CsV₃Sb₅ 被发现具有奇特的压力相图,在常压下兼具电荷密度波序(CDW)和超导电性。研究发现,CDW 序中存在手性、电子向列性、时间反转对称破缺等一系列非常规性质。在压力调控下,CDW 序在 *P*_c~1.9 GPa 时被完全抑制,而超导转变温度*T*_c呈现出双拱形的非单调变化,这为研究非常规超导提供了很好的平台。目前,超导态虽然得到了大量研究,但其超导配对机制仍然存在争议。部分实验表明,CsV₃Sb₅的超导序参量表现为各向异性*s* 波或两能隙(*s*+*s*)波对称。然而,CsV₃Sb₅零磁场下的热导率具有有限剩余线性项,表明超导能隙结构中可能存在节点。压力下,多项研究也表明在 CDW 序被完全抑制后出现非常规超导电性。此外,输运测量发现角度依赖的磁电阻和*c*轴电阻率均存在双重旋转对称性,揭示了超导态的面内向列性,这一特性是拓扑超导体候选材料的重要特征。然而,目前仍不清楚该双重对称性及超导配对行为随压力如何演化,因而仍需进一步的实验探索。

本报告中^[1],我们将介绍高压下 CsV₃Sbs单晶样品的极低温高压核四极矩共振实验测量结果。实验 发现:(1)在常压下,虽然自旋晶格弛豫率 1/T₁在 T_e之下出现了一个小的 Hebel-Slichter 相干峰,然而 在 T≈0.4 T_e之下,1/T₁随温度降低呈现 T³ 依赖关系,表明 CsV₃Sbs在常压下具有多能隙结构,其中较小 的能隙中含有线节点;(2)在压力超过 CDW 的量子临界压力($P_e \approx 1.85$ GPa)后,虽然 Hebel-Slichter 相干峰消失了,但是 1/T₁在 T_e之下以快于 T⁵的速度下降,表明超导能隙完全打开;(3)通过 ac 磁化率 的测量,发现在 $P > P_e$ 的相图区域内,上临界磁场 H_{C2} 均呈现出明显的二重对称性,表明超导态破坏了 C_6 对称性。基于对实验结果的综合分析,研究团队提出 CsV₃Sbs在高压下形成一种特殊的 s + id 配对对 称性,这不仅具有完全打开的超导能隙,还自发打破晶体的 Cs旋转对称性,能够自洽解释 1/T₁以及 H_{C2} 在高压下的行为,并指出随着压力增大而增强的自旋涨落可能是导致 s + id 超导态出现的原因。此外, 实验还发现局域电场梯度在 s + id 超导态内出现了电荷再分布及 Cs对称性破缺的行为。该工作不仅明确 了笼目超导体 CsV₃Sbs的电子关联和非常规超导配对随压力的演化,也为理解该体系中电荷有序、自旋 涨落与非常规超导之间的相互作用关系提供了关键实验依据,并为后续理论模型的建立提供了重要参 考。

关键词: CsV₃Sb₅、核四极矩共振、超导能隙、自旋涨落 参考文献

^{1.} Feng, X.Y., Zhao, Z., Luo, J. *et al.* Fully-gapped superconductivity with rotational symmetry breaking in pressurized kagome metal CsV₃Sb₅. *Nat Commun* **16**, 3643 (2025).

超导 A15 型 La4H23 中的反常金属态

郭鉴宁¹, 黄晓丽¹, Dmitrii Semenok², 崔田³

1高压与超硬材料全国重点实验室,吉林大学物理学院,长春 130012
2北京高压科学研究中心,北京
3宁波大学物理科学与技术学院,宁波 315211

摘要:氢化物超导体因其有望实现室温超导,持续激发凝聚态物理与材料科学领域的研究热情。当前研究焦点集中于提升超导转变温度的新型氢化物超导体探索。多重极端条件(高压/高温与强磁场)的引入将为氢化物超导体研究开辟新视角,其中强磁场下的输运性质研究 对理解常规氢化物超导机制具有重要意义。本工作报道了新型立方 A15 型 La₄H₂₃ 在 118 GPa 压力下实现 105 K 超导转变温度的实验证据,并发现该材料在 40 K 以下非超导态存在强脉 冲磁场诱导的显著负磁阻效应。进一步构建了高压环境下 La₄H₂₃ 高达 68 T 的完整磁相图。 本研究揭示了 A15- La₄H₂₃ 在强磁场下的异常电子结构特性,对深化理解氢化物超导体量子 输运行为具有重要推动作用。

关键词: 超导, 高压, 负磁阻, 强磁

镍氧化物高温超导体 La₃Ni₂O₇ 的超高压演化

李婧姬1、彭帝2,马培跃1,张恒源1,邢贞芳3,霍梦五1,

董洪亮^{2,3},孙华蕾⁴,曾桥石^{2,3},毛河光^{2,3},王猛¹

¹中山大学物理学院 ²上海前瞻物质科学研究院

3北京高压科学研究中心

4中山大学理学院

Email: lijy89@mail2.sysu.edu.cn; wangmeng5@mail.sysu.edu.cn

摘要:

Ruddlesden Popper 相双层镍氧化物 La₃Ni₂O₇在压力诱导下展现出了 80K 的高温超导电性¹。镍氧化物由此正式跻身高温超导家族新贵。随着高温超导电性的发现,La₃Ni₂O₇超导随压力的进一步演化规律成为了人们关注的问题。此外,目前单晶及多晶样品的零电阻已被独立验证^{2.3},然而迈斯纳效应仍未得到得到实验证实。La₃Ni₂O₇的体超导电性亟待验证。另一方面,La₃Ni₂O₇超导态的出现伴随着结构相变的发生,意味着二者可能存在关联。目前超导相所处的晶体结构仍存在争议⁴。基于上述科学问题,本工作系统性研究了 La₃Ni₂O₇ 由常压至 104 GPa 的超导电性演化趋势及结构演化。研究结果显示La₃Ni₂O₇ 的超导临界温度 *T*_c^{onset}与压力 *P* 呈现近"直角三角形"的超导相图,并在 90 GPa 以上几近消失。高压衍射结果显示 La₃Ni₂O₇ 分别在 12.3 GPa 和 46.8 GPa 经历至 *Fmmm* 结构和 *I4/mmm* 结构的相变。高压直流磁化测量首次证实了迈斯纳效应,超导体积分数高达 62.7%,确认了体超导电性。本工作研究结果厘清了高温超导体 La₃Ni₂O₇ 目前存在的几个关键争议,为后续超导配对机制研究提供了坚实的实验基础。

关键词: 镍氧化物高温超导体, 超高压研究, 高压结构相变, 高压迈斯纳效应

参考文献

- 1. H. L. Sun, et al. Nature 621.493 (2023)
- 2. Y. Zhang, et al. Nat. Phys. 20, 1269 (2024)
- 3. G. Wang, et al. Phys. Rev. X 14, 011040 (2024)
- 4. L. Wang, et al. J. Am. Chem. Soc. 146, 7506 (2024)
- 5. J. Y. Li, et al. arXiv:2404.11369 (2024)

223

层状交变磁体 La₂O₃Mn₂Se₂中压力驱动自旋交叉诱导的异常面内晶 格塌缩

栗一康、阳晔、张雨晴、桂志刚、温茜凯、李彦君、刘清源、王贤龙、王锐、

应剑俊、陈仙辉

中国科学技术大学未来技术学院 Email: <u>liyk@ustc.mail.edu.cn</u>

摘要:

层状材料通常沿面外方向表现出更强的压缩特性,因此压力往往导致 c 轴晶格常数塌缩,并在高压 下促使体系呈现更强的三维特性。本研究通过高压电输运测试与 X 射线衍射实验,首次在交变磁体 La2O3Mn2Se2中发现一种由压力驱动的绝缘体-金属转变,该转变伴随非常规的面内晶格塌缩而非传统面 外塌缩。此现象可归因于 Mn²⁺离子自旋态从高自旋(HS, S=5/2)向中间自旋(IS, S=3/2)的跃迁, 形成压力协同驱动的自旋交叉效应。进一步研究表明,La2O3Mn2Se2的压力驱动莫特相变具有轨道选择 性特征。本工作首次揭示了层状材料在无结构对称性破缺前提下的面内晶格塌缩现象,为理解层状材料 高压物理与相变机制提供了新视角,同时为压力驱动自旋交叉多功能材料设计提供了独特模型体系。

高压下铋掺杂 122 型铁基超导体 BaFe2(As1-xBix)2的超导特性演化

苏畅1、陈吴吴2、贾雅婷2、朱金龙1,2、邢令义3、刘影1,2

1南方科技大学物理系 2粤港澳大湾区(广东)量子科学中心 3湖北师范大学物理与电子科学学院 Email: liuying@quantumsc.cn

摘要:

近年来,本研究系统探究了铋(Bi)掺杂的 BaFe2(As1-xBix)2单晶在高达 8.7 GPa 压力下的输运特性和点接触安德烈夫反射谱(PCARS)性质。超导临界温度(Tc)和上临界场(Hc2)随压力增加先降低,在约 2.9 GPa 处出现局部极大值,随后进一步被抑制,这一现象与母化合物中的超导转变相关。 电导谱与两带 s 波模型一致,证实了多带超导性。超导能隙和耦合强度随压力单调下降,其中较大能 隙从强耦合转变为弱耦合。这些结果为理解等价掺杂 122 型铁基超导体的结构、电子和超导性质之间 的相互作用提供了新视角。



图 1 BaFe2(As1-xBix)2 单晶超导特性随压力变化

关键词: BaFe₂As₂, 金刚石对顶砧, 电输运, 点接触谱 参考文献

- 1. Si, J.; Zhao, J.; Liu, Y.et al. The Superconductivity in Bi-Doped BaFe₂As₂ Single Crystals. Materials 2024, 17, 929
- Su, C.; Chen, W.; Cheng, W. et al. Pressure-induced superconductivity in Bi-doped BaFe₂(As_{1-x}Bi_x)₂ single crystals. Chin. Phys. B 2025

压力驱动 6R-TaS2 中的双穹顶超导以及超导再入

吕心邓、黄艳萍*、崔田*

宁波大学高压物理科学研究院 Email: huangyanping@nbu.edu.cn, cuitian@nbu.edu.cn

摘要:

层间耦合对层状材料超导的调控起着关键作用。范德华异质结因其奇特的层间耦合特性而备受关注。其中,6*R*-TaS2是由交替堆叠的1*T*和1*H*-TaS2单层组成天然的范德瓦尔斯异质结化合物,是研究层间耦合和超导电性绝佳的平台。

本项工作中通过测量高压原位电输运性质、霍尔效应和原位同步辐射 X 射线衍射(XRD)系统探 究了 6*R*-TaS₂在不同压力下的超导特性,并构建了其温度–压力相图。结果显示(如图 1 所示), 6*R*-TaS₂的超导转变温度(*T*_c)在 0-32.5 GPa 范围内随压力变化并非简单的单调变化而是呈现出双穹顶行为,第一个穹顶和第二个穹顶分别出现在 0-5.3 和 6.8-32.5 GPa。当压力超过 32.5 GPa 后,超导电性消失。值得注意的是,在 56.6 GPa 观察到一个新的超导相,其 *T*_c约为 2 K,且随压力升高而增强。XRD 结果显示整个过程中未发生明显结构相变,表明超导相图的异常行为源于电子结构演化而非晶体结构变化。

结合第一性原理计算和霍尔效应分析,我们发现层间耦合在调控电子结构中起关键作用。第一个穹顶源于 T 层和 H 层之间电荷转移的变化。第二个超导穹顶的出现归因于费米面重构导致的态密度(DOS)变化。值得注意的是,超导性的再现与 Lifshitz 密切相关, S-p 轨道的贡献尤为关键。本研究揭示了层间耦合通过调控电荷转移与费米面演化,引发多重超导行为,并首次在未发生结构转变的过渡金属二硫属化合物(TMDs)体系中观察到超导性的再现,为理解 TMDs 超导提供了新的物理视角。



图1 高压下 6R-TaS2 的超导相图。

关键词: 层间耦合,超导电性,高压,异质结参考文献

1. X. Lv, Y. Huang and T. Cui, Re-emergence of superconductivity via pressure-induced Lifshitz transition in preserved 6*R*-TaS₂ crystal structure, Sci. China-Phys. Mech. Astron. 67, 128211 (2024).

铁磁材料 CeAgGa 在高压下的电阻行为

<u>沈晓玲</u>¹、Uwatoko Yoshiya²、马杰¹

¹上海交通大学物理与天文学院 ²The university of Tokyo,Institute for Solid State Physics Email: xlshen@sjtu.edu.cn

摘要:

铈基材料在低温处经常展现了丰富有趣的现象,包括近藤效应,超导电性等等。经过多年研究发现 这些不同的磁特性可能是 RKKY 相互作用和近藤效应两种竞争机制之间微妙平衡的结果[1]。一般来说, 铈原子的局域 4f 自旋和传导电子自旋之间的耦合常数 J₆,以及 4f 和传导电子态 V₆之间的杂化能决定 了它们的基态性质。这两种效应可以用磁场,外加压力或掺杂等方法进行调节。CeAgGa 是一种铁磁材 料,铁磁态转变温度在~5.5 K [2,3],且具有 CeCu₂相的 Imma 结构,Ag 和 Ga 原子随机分布在 8h 位置[4]。 为了研究 CeAgGa 在高压下的行为,我们用电弧炉,在高纯度的氩气环境中合成了多晶样品,并用 PPMS 测量了常压下的电阻行为。如图 1 所示,电阻不仅随温度变化逐渐减小,还在低温处出现一个微弱的下 坠行为。插图显示的是低温处的电阻变化,由于 CeAgGa 的磁性转变而在 5K 左右处出现一个微弱的下 坠行为。插图显示的是低温处的电阻变化,由于 CeAgGa 的磁性转变而在 5K 左右处出现一个驼峰,与 以前的论文所述具有一致性[2]。除此之外,R_{300K}/R_{2k}大约只有 1.07 左右,意味着 CeAgGa 中的结构紊 乱,这可能造成 CeAgGa 磁序的不均匀。在此次报告中,我们将展示 CeAgGa 在压力最高到达 14 GPa 下的电阻行为,讨论它的具体物理性质。



图 1:CeAgGa 的电阻随温度的变化;插图所示为 CeAgGa 在低温处的电阻行为。

关键词: 铈基材料, 高压, 磁性

参考文献

- [1] S. Doniach, in: Valence Instabilities and Related Narrow Band Phenomena, p. 169.
- [2] J. Goraus, et al. Eur. Phys. J. B, 80: 65-71(2011).
- [3] D T. Adroja, et al. Physica B, 186: 566-568(1993).
- [4] J. Goraus, et al. phys status solidi (b), 248(12): 2857-2863(2011).

专题代号: J

非笼型氢化物 LaB₂H_a的合成和超导性质研究

<u>宋晓旭</u>,郝晓宽,魏旭东,何新玲,刘寒雨,马良,刘广韬,王洪波,牛景 雨,王绍杰,齐彦鹏,柳忠元,胡文涛,徐波,王霖*,高国英*,田永君 燕山大学材料科学与工程学院

Email: songxiaoxu@stumail.ysu.edu.cn

摘要:

自超导现象被发现以来,人们对室温超导的追求已持续了一个多世纪,它有可能给各行各业带来革命性的变化。氢化物是实现室温超导的理想候选物质,人们已经在理论和实验上对其进行了广泛的探索,其中,具有代表性的笼型氢化物 LaH₁₀在 180 GPa 的超导转变温度(*T*_c)高达 260 K^{1,2}。然而,具有高*T*_c的氢化物只有在极端压力下才能稳定存在,*T*_c超过 110 K 的超导体的稳定压力通常高于 120 GPa³⁻⁶,这极大的限制了此类超导材料的应用。

本工作中,我们利用金刚石对顶砧高压技术和原位激光加热技术,成功的在 150 GPa 和 2000 K 的 条件下合成了非笼型的三元氢化物 LaB₂H₈。电输运测量表明,样品在 90 GPa 有高达 106 K 的 *T*c 和 34 T 的上临界磁场。通过高压原位的 XRD 测量,我们确定了样品的金属子晶格结构,并且发现该结构可稳 定至 59 GPa。结合实验结果,对多个候选相的晶体结构、稳定性、电子性质以及超导电性的预测,确 定合成产物是与实验结果最相符的 *I4/mmm* LaB₂H₈。值得注意的是,LaB₂H₈呈现出一种以强共价键为 特征的非笼型结构,其中 B 与近邻的 B 和 H 原子以共价键结合形成了 B₂H₈单元。这些发现表明,将非 金属元素掺入已有的二元金属氢化物体系可以在保留较高的 *T*c情况下降低其稳定压力,这为在多元氢 化物领域探索能在低压甚至常压稳定的高 *T*c氢化物提供了一条前景广阔的途径。

关键词: 三元氢化物 高温超导 非笼型结构 稳定性 参考文献

1. Drozdov, A. P. et al. Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures. Nature 2019, 569, 528-531.

2. Somayazulu, M. et al. Evidence for Superconductivity above 260 K in Lanthanum Superhydride at Megabar Pressures. *Phys. Rev. Lett.* 2019, *122*, No. 027001.

3. Ma, L. et al. High-Temperature Superconducting Phase in Clathrate Calcium Hydride CaH₆ up to 215 K at a Pressure of 172 GPa. *Phys. Rev. Lett.* 2022, *128*, No. 167001.

Troyan, I. A. et al. Anomalous High-Temperature Superconductivity in YH6. *Adv. Mater.* 2021, *33*, No. 2006832.
Chen, S. et al. High-temperature superconductivity up to 223 K in the Al stabilized metastable hexagonal lanthanum superhydride. *Natl. Sci. Rev.* 2024, *11*, nwad107.

6. Semenok, D. V. et al. Superconductivity at 253 K in lanthanum-yttrium ternary hydrides. Mater. Today. 2021, 48, 18-28.

高压下多层碲烯中的双超导穹顶

田灿1、叶怡玮2、刘晨晨2、张昱晨2、黄晓丽2,*

¹新疆大学物理科学与技术学院 ²吉林大学物理学院超硬材料国家重点实验室 Email: huangxiaoli@jlu.edu.cn (X. Huang)

摘要:

自 2004 年石墨烯被成功制备以来,二维材料引发了全球范围内的研究热潮。其中,由单一化学元 素构成的二维材料(如硅烯、锗烯等)因其独特的结构简单性与新奇物性,成为凝聚态物理和材料科学 等领域的研究热点。值得注意的是,这类单元素二维材料往往展现出与其三维体相材料截然不同的物理 特性。尽管碲元素的三维体相材料已得到系统研究,但压力对二维多层碲烯晶体结构及超导性能的影响 仍待深入探索。

在此,我们通过高压调控首次在多层碲烯中观测到双超导穹顶现象。原位高压拉曼光谱和同步辐射 X 射线衍射结果显示,样品经历了一系列结构相变过程:首先在 6.2 GPa 附近由准一维六方相(P3121)转变为准二维单斜相(P21);随后在 19.1 GPa 时演化为三维菱方相(R3m);最终在 30.9 GPa 以上形成 三维立方结构(Im3m)。这些结构演变反映了体系在压力作用下向更高维度、更致密结构转变的基本规 律。高压低温电输运测量结果表明,多层碲烯在 0.5 GPa 出现超导现象,其转变温度呈现双穹顶特征,分别在 7.6 GPa 和 34.0 GPa 达到约 4.3 K 和 6.1 K 的极大值。这种双超导穹顶行为可归因于压力诱导的 链间和层间相互作用增强所引起的维度变化与结构调制的协同效应。



图 1. 多层碲烯在高压下的结构和超导相图, 垂直虚线表示结构相变的压力点。

关键词: 高压, 多层碲烯, 晶体结构, 超导 参考文献

- 1. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices, Nature 556, 43 (2018).
- N. Zhang, G. Zhao, L. Li, P. Wang, L. Xie, B. Cheng, H. Li, Z. Lin, C. Xi, J. Ke, M. Yang, J. He, Z. Sun, Z. Wang, Z. Zhang, and C. Zeng, Magnetotransport signatures of Weyl physics and discrete scale invariance in the elemental semiconductor tellurium, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 117, 11337 (2020).
- S. Wang, Y. Han, S. Sun, S. Wang, C. An, C. Chen, L. Zhang, Y. Zhou, J. Zhou, and Z. Yang, Pressure induced nonmonotonic evolution of superconductivity in 6R-TaS₂ with a natural bulk Wan der Waals heterostructure, Phys. Rev. Lett. 133, 056001 (2024).

Ta₂NiSe₅激子绝缘相的高压超快光谱研究

<u>王晓伟 ^{1,2}</u>, 牛光明¹, 隋来志 ^{1,*}, 袁开军 ^{1,*} 1中国科学院大连化学物理研究所, 大连, 116023 2中国科学院大学, 北京, 100039 *Email: lzsui@dicp.ac.cn, kjyuan@dicp.ac.cn

摘要:

近年来,trARPES 实验手段证明了 Ta₂NiSe₅ 中激子绝缘态 (Excitonic insolutor, EI) 的结构起源以及结构 对称性破缺的自发性。然而我们的高压拉曼实验结果表明在非 EI 相中,激子涨落造成的准弹性散射仍 然存在,直到结构相变出现才完全消失。我们利用反射式瞬态光谱,研究了 Ta₂NiSe₅ 压力调控下载流子 和相干声子动力学的演化。结果表明,与 EI 态耦合的 2THz 相干声子寿命在相变前后出现反常变化, 即在 EI 相的压力区间内,其退相干减慢,这与我们拉曼实验测得的结果相矛盾,我们认为在 EI 相中, 有序激子提供了低阻尼背景,使 2THz 相干声子寿命增长,我们的研究为了解强相关体系激子-声子耦 合提供了新视野。



图 1 EI 态对 2THz 相干声子的保护作用

关键词: 激子绝缘态; 电声耦合; 强关联; 高压超快光谱 参考文献

- 1. Werdehausen et al., Sci. Adv. 2018; 4: eaap8652
- 2. Kim, K. et al. Nat Commun. 2021; 12: 1969.

Kagome 单晶 Lu2Ti6B9 中压力诱导超导电性

王泽蔚1、李书香1、徐升1、陶前1、许祝安1

1浙江大学物理学院, 杭州 310058

Email: 12245022@zju.edu.cn

摘要:

近年来,具有 Kagome 晶格的拓扑材料及其性质一直为材料及凝聚态物理领域的前沿热点,其中超导电性的出现更是引人注目^[1]。在这里,我们利用 Bi 自助熔的方法生长出了具有畸变 Ti-kagome 及Bi-honeycomb 晶格的单晶 Lu₂Ti₆Bi₉^[2],同时进而采用金刚石对顶砧施加最高至 22.07 GPa 的一系列压力,并测量了其在高压下的电阻变化。常压下 Lu₂Ti₆Bi₉ 单晶电阻在 2~300 K 范围内变化幅度很小,当施加 0.25 GPa 的压力后,Lu₂Ti₆Bi₉ 单晶即开始出现超导电性,其超导转变温度约为 5 K。随着压力的不断增加,其超导转变温度也随之变化:在 2.25 GPa 时超导转变温度提高至最高约 6.7 K,之后超导转变温度 随压力增加缓慢降低至 10.83 GPa 时的约 6.3 K。在压力提高至约 15.07 GPa 时电阻上出现两个转变,转变温度分别为 7.2 K 和 6.0 K。随着压力提高,两个转变的温度均逐渐降低,并在 22.07 GPa 时分别达到 6.7 K 和 5.0 K。我们的研究首次发现了一个新的畸变 kagome 晶格材料 Lu₂Ti₆Bi₉ 在压力下的超导特性,而且其中丰富的物理性质亟待进一步探究。

关键词: 高压, 超导电性, Ti-Kagome 格子

参考文献:

[1] Q. Wang, P. Kong, W. Shi et al. Charge density wave orders and enhanced superconductivity under pressure in the kagome metal CsV₃Sb₅. Advanced Materials 33, no. 42 (2021): 2102813.

[2] Brenden R. Ortiz, H. Miao, David S. Parker et al. Evolution of Highly Anisotropic Magnetism in the Titanium-Based Kagome Metals LnTi3Bi4 (Ln: La…Gd³⁺, Eu²⁺, Yb²⁺). Chemistry of Materials 2023 35 (22), 9756-9773.

高压下锰基化合物 MnB4 中超导电性的发现

<u>项浙宁</u>*、张英杰*、鲁清*、李庆*、李易文、黄天衡、朱怡杰、叶永泽、孙建*、

闻海虎*

南京大学超导物理与材料研究中心 南京大学物理学院,南京 210093 Email: xiangzhening@smail.nju.edu.cn

摘要:

超导的发生需要电子配对以后形成库珀对,这些库珀对可以无损耗的传输电流。一般情况下,超导体库珀对中的两个电子的自旋方向相反,形成所谓自旋单态配对。这种超导很容易被磁性杂质所破坏,如在富氢元素超导体的探索中,研究人员一般不会考虑 3d 过渡金属磁性元素,因为强的磁性会破坏富氢元素超导体中基于电-声耦合的超导配对。然而,从另一个角度考虑,由于轻元素(包含 H, B, C, N等)具有更高的零点动能,其形成的化合物普遍具有较高的量子动能和活跃性,因此也许可以作为磁性元素之间磁超交换相互作用的破坏者,阻止长程磁有序的建立。在上述情形下,3d 磁性过渡金属元素电子的局域性和巡游特性可以得到很好的平衡,超导的配对不再依靠基于 BCS 理论的电-声子相互作用,而是轻元素介导的强自旋涨落,因此提出了一种将 3d 磁性过渡金属元素和轻元素相结合的新超导材料探索思路,并将其命名为 MHFV 模型 (Magnetic moments plus High Frequency Vibrations)。

在上述物理思想的指导下,我们将 3*d* 过渡金属元素 Mn 与轻元素 B 相结合,在一种富含轻元素硼 的锰基化合物 MnB4 中利用高压诱导出高达 14.2 K 的超导电性,是目前报道的所有 Mn 基超导体中 *T*。最高的。通过施加压力, MnB4 低温下的绝缘基态逐渐被抑制,并且低温电阻在约 30 GPa 左右突然下降。随着压力的进一步增加,超导转变温度达到本次研究的最大值约 14.2 K @150 GPa,如图一所示。高压 下的同步辐射测试发现 MnB4 在上述压力范围内一直维持单斜的晶体对称性,但是晶格常数 *b* 和 *c* 在超 导产生的压力区间发生了数值上的反常交叉。基于电声子耦合的理论计算得到 MnB4 在高压下的超导转 变温度非常低 (<1 K),说明在 MnB4 中发现的超导电性很可能是非常规的。我们的研究为在磁性 3*d* 过渡金属化合物,尤其是 Mn 基化合物中探索具有更高转变温度的新超导材料提供了有用的研究参考,并为 Mn 基非常规超导研究提供了一个重要的材料平台。



图 1 (a) MnB4在压力下的超导相图。(b) 在测试的最高压力(150 GPa)下,超导起始转变温度为 14.2 K,同时正常态表现出符合费米液体的金属性行为。

关键词: 高压超导体、MnB4、非常规超导、3d 过渡金属 参考文献:

 <u>Z.-N. Xiang</u>[#], Y.-J. Zhang[#], Q. Lu[#], Q. Li^{*}, Y. Li, T. Huang, Y. Zhu, Y. Ye, J. Sun^{*}, H.- H. Wen^{*}, Superconductivity up to 14.2 K in MnB₄ Under Pressure. *Advanced Materials* **37**, 2416882 (2025).

Zintl 相化合物 6R-CaGe2 在高压下的结构相变及超导电性

徐昆博1、李全军1

¹吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: xukb22@mails.jlu.edu.cn

Zintl 相化合物通常由带正电性的碱金属或碱土金属和电负性较强的后过渡金属或 13-15 族类金属 组成,其成键方式包含离子键,金属键和共价键。凭借其丰富的晶体结构,Zintl 相化合物表现出超导 电性、拓扑性质、磁有序性和热电性等独特的物理特性^[1]。压力作为一种清洁且有效的外界调控手段, 能够显著改变材料的原子间距、调节电子间相互作用,从而实现对材料结构和物性的精确调控。在Zintl 相化合物中,6R-CaSi2在高压下经历了从 *R-3m* 相到 *P-3m*1 相再至 *P6/mmm* 相的结构演变,其超导转变 温度可达 14 K^[2]。本研究针对 6R-CaGe2 在高压下的结构与电输运性质研究空白,开展了系统的高压实 验测试。主要发现包括: 1、6R-CaGe2 分别于 10 GPa 和 30 GPa 附近相变为 P-3m1 相与高压 II 相; 2、 实验结果显示 6R-CaGe2 在低压下表现为半金属特性,至 10 GPa 附近首次结构相变后转变为金属特性,并在低温条件下伴随超导转变;3、超导转变温度随压力增加呈先增大后趋于稳定的变化规律,超导转 变温度约为 3 K; 4、卸压后 *P-3m*1 相可被截获,但超导无法截获至常压。本工作深入揭示了 6R-CaGe2 在高压下的结构变化及其超导行为,为探究 6R-CaSi2 与 6R-CaGe2 超导临界温度差异的影响因素提供了 平台,同时对提升 Zintl 相化合物的超导临界温度具有潜在的参考价值。



图 1 6R-CaGe2 的温度-压力相图

关键词: 高压; 结构相变; 超导电性; Zintl 相化合物 参考文献

[1] Shuai, J, et al. "Recent progress and future challenges on thermoelectric Zintl materials." Materials Today Physics 1 (2017): 74-95.

[2] Sanfilippo, S., et al. "Superconducting high pressure CaSi₂ phase with T_c up to 14 K." Physical Review B 61.6 (2000): R3800.

高压调控转角双层石墨烯体系反常霍尔效应

叶春晖1、王宇鹏1*、张增明2*

¹中国科学技术大学物理系 ²中国科学技术大学物理实验教学中心 Email: wangyupeng@mail.ustc.edu.cn, zzm@ustc.edu.cn

摘要:

近年来,以转角双层石墨烯为代表的摩尔超晶格材料成为了诸多强关联和拓扑新奇物性的研究平 台,如非常规超导、关联绝缘态、磁性和分数量子反常霍尔效应等。石墨烯摩尔超晶格体系的新奇物性 往往出现在"魔角"附近,常压下对角度的要求较为严苛;而外界压力可以有效调控电子的层间跃迁, 改变"魔角",从而在更大的参数空间中研究强关联和拓扑行为。通过金刚石对顶砧装置对器件施加高 压,本课题组研究了大转角双层石墨烯体系中反常霍尔效应的压力演化。在最佳压力下,在填充因子 v =-2、1、2、3 处出现关联绝缘态(CI),表明压力将"魔角"调控到器件角度附近。在 v = 1、2 的关 联绝缘态附近,展现出延伸至零磁场的关联陈绝缘态(CCI),陈数分别为 C = -1、-2,同时伴随着反 常霍尔电阻平台,最高持续到约 8 K。变温测试表明,该体系在 v = 1、2 附近展现了非公度陈绝缘态(ICI) 的特征。随着压力继续加载,反常霍尔效应逐步衰减。本研究清晰地表明,高压是一种拓展摩尔超晶格 材料强关联和拓扑物态参数空间的有效手段,为探索二维材料新奇量子输运现象提供了新的途径。

关键词:转角双层石墨烯;金刚石对顶砧;高压;反常霍尔效应;强关联体系;拓扑物态 参考文献

- Carr S, Fang S, Jarillo-Herrero P, et al. Pressure dependence of the magic twist angle in graphene superlattices[J]. Physical Review B, 2018, 98(8).
- 2. Sharpe A L, Fox E J, Barnard A W, et al. Emergent ferromagnetism near three-quarters filling in twisted bilayer graphene[J]. Science, 2019, 365(6453): 605-608.
- Stepanov P, Xie M, Taniguchi T, et al. Competing Zero-Field Chern Insulators in Superconducting Twisted Bilayer Graphene[J]. Physical Review Letters, 2021, 127(19): 197701.

镍氧化物 Pr4Ni3O10-8压力下的超导特性的发现

黄星1#、张恒源1#,李婧娠1,霍梦五1,陈俊峰1,邱钲阳1,马培跃1,黄潮

欣¹, 孙华蕾^{2*}, 王猛^{1*}

1中山大学物理学院

2中山大学理学院

Email: zhanghy387@mail2.sysu.edu.cn; wangmeng5@mail.sysu.edu.cn

摘要:(摘要正文,中文,宋体五号字,其中英文和数字为 Times New Roman 五号字)

近年来,我国科学家首次在 RP 相双层镍氧化物 La₃Ni₂O₇中发现其在压力下表现出 80 K 的超导转 变温度¹,实现了从 0 到 1 的重大科研突破。随后,越来越多的镍氧化物超导体被制备和研究, Pr 元素 掺杂的双层 RP 相 La₂PrNi₂O₇和三层 RP 相 La₄Ni₃O₁₀也在高压下观察到超导特性 ^{2,3}。Pr³⁺离子部分取代 了 La₂PrNi₂O₇中 La³⁺离子,在不改变其超导性的前提下显著提高了超导相纯度,但在 La_{3-x}R_xNi₂O₇中掺 杂更高水平的稀土元素仍然是一个挑战。幸运的是,三层镍酸盐R₄Ni₃O₁₀ (*R*=La, Pr 和 Nd)相相对稳定 ³,为探索该效应提供了理想的平台。基于上述内容,本工作研究利用溶胶凝胶法合成出了 Pr₄Ni₃O_{10-δ} 多晶样品,并利用金刚石对顶砧技术对样品进行压力下结构和电子输运性质。常压下 Pr₄Ni₃O_{10-δ}分别在 约 157.6 K 和 4.3 K 时在 Ni 和 Pr 亚晶格上表现出密度波转变,且密度波会逐渐被压力所抑制。在 20 GPa 左右, Pr₄Ni₃O_{10-δ}会经历由单斜 *P*₂₁/*a* 到四方相*I*4/*mmm*转变,且电阻在 30 K 时出现明显下掉,并表现 出磁场依赖性,暗示着超导的出现。Pr₄Ni₃O_{10-δ}超导性的发现拓宽了镍酸盐超导体的家族,并为研究 RP 相镍氧化物的超导机理提供了一个新的平台。



图 1 Pr4Ni₃O₁₀₋₆磁性、比热、结构及压力下的电输运测量结果。(a) 常压下磁化率;(b) 比热及电阻率观察到两个密度波转变;(c) 随压力增加,结构从单斜相向四方相转变;(d) 压力增加使电阻减小并出现超导转变;(e) 超导转变温度存在磁场依赖;(f) 超导电性上临界场拟合;(g) 密度波序与超导电性在压力下的相图。

关键词: 镍氧化物高温超导体, 超高压研究, 高压结构相

Pressure-modulated electrical properties in twisted bilayer graphene

Tiansong Zhang^{1,2}, Yabin Chen^{1,2,*}

¹School of Aerospace Engineering ²School of Interdisciplinary Science, BIT Beijing Institute of Technology, Beijing 100081 *Email: chyb0422@bit.edu.cn

Abstract: The twisted bilayer graphene (tBLG) has emerged with fascinating electronic structures, superconducting phase, insulating phase and other quantum phenomena owing to strong correlations, which sparked the growing research interests in the unconventional superconducting transition mechanism and tunable properties for their potential applications in nanoelectronics. Hydrostatic pressure can effectively regulate the interlayer interactions in tBLG, thereby altering its electronic structure-related physical properties. We developed an efficient method for fabricating micro-nano electrical devices of tBLG in diamond anvil cells (DAC). And we found that the resistance of tBLG (with a twist angle of 1.36°) decreasing with temperature increasing under different pressure. The tBLG exhibits a correlated insulating state under hole doping with pressure increasing to 4.0-4.2 GPa. The bandgap of tBLG increases with pressure but decrease when the pressure exceeds 2.0 GPa. Our results could supply a unique platform to explore the pressure-tunable strong correlation electronic properties of 2D material twisted electronics systems.



Fig.1 Transport measurements of the 1.36° tBLG in DAC

Key words: Twisted bilayer graphene; High pressure; Micro-nano electrical devices; Electrical properties References

Cao, Y.; Fatemi, V.; Demir, A.; Fang, S.; Tomarken, S. L.; Luo, J. Y.; Sanchez-Yamagishi, J. D.; Watanabe, K.; Taniguchi, T.; Kaxiras, E.et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. *Nature* 2018, 556 (7699), 80.

[2] Cao, Y.; Fatemi, V.; Fang, S.; Watanabe, K.; Taniguchi, T.; Kaxiras, E.; Jarillo-Herrero, P. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. *Nature* **2018**, *556* (7699), 43.

高压下Ti1-xMnx合金中观测到高达26 K的超导电性

<u>张英杰</u>*、朱怡杰*、李庆*、项浙宁、黄天衡、朱政彦、李易文、 谢威、孙建*、闻海虎*

南京大学超导物理与材料研究中心,南京大学物理学院,南京210093

Email: yjzhang 0214@smail.nju.edu.cn

摘要:

3d 过渡金属化合物中的超导电性大多具有非常规的特性,但是由于局域磁矩的存在, 在该类材料中通常难以得到超导。尤其是对于含锰(Mn)的化合物,因为它们大都具有较强 的磁性,因此在 Mn 基材料中发现的超导电性非常少,且对应的超导转变温度(*T*_c)都很低。 单质元素钛的 *T*_c大约为 0.5 K,早期 Matthias 等人注意到在 Ti 单质中掺杂进入 Mn、Cr、Fe 等磁性元素后,超导转变温度能够增长到 2-4 K 左右,出乎人们的预期。我们在前期的研究 工作中发现,在 Ti 单质中掺杂进入磁性元素 Mn 之后,会在立方结构的β相 Ti_{1-x}Mn_x中形成 增强的体超导电性,并且超导电性的增强可能与材料的关联效应或磁性涨落有关^[1]。最近, 我们进一步对具有体超导特征的立方结构 Ti_{1-x}Mn_x 合金进行了高压下的系统研究,发现 *T*_c 随压力的增加而单调递增,在最高 160 GPa 下 *T*_c达到 26 K,是常压下 *T*_c (2.5 K)值的十倍, 也是目前已报到的含 Mn 化合物中超导转变温度最高的合金超导体,如图 1 所示。进一步的 同步辐射测量发现高压下 Ti_{1-x}Mn_x合金一直维持β相结构,在中压力区间范围内,该超导态 的上临界场超过泡利极限,且基于电声子耦合的第一性原理计算结构无法跟实验结果相吻合, 尤其是在低压 *T*_c的快速增长的区间。因此,我们认为高压下 Ti_{1-x}Mn_x合金中如此高的超导转 变温度的超导现象可能具有非常规的配对机理。上述系列研究为锰基化合物中的高温超导电 性探索提供了重要线索。



图1 左图为高压下 Ti_{1-x}Mn_x 合金的超导相图,插图为晶体结构示意图,右图为上临界磁场及 其拟合结果,虚线代表不同压力对应的泡利极限。

关键词: 高压超导体、Til-xMnx 合金、非常规超导、3d 过渡金属

参考文献:

1. <u>Ying-Jie Zhang</u>, Qing Li*, Zhengyan Zhu, Yiwen Li, Wei Xie, and Hai-Hu Wen*, Enhanced superconductivity in Ti_{1-x}Mn_x alloys through Mn doping. *Phys. Rev. B* **2023**, 108, 054516.

^{2. &}lt;u>Ying-Jie Zhang</u>, Yijie Zhu, Qing Li^{*}, Zhe-Ning Xiang, Tianheng Huang, Jian Sun^{*}, and Hai-Hu Wen^{*}, Record-high superconducting transition temperature in a $Ti_{1-x}Mn_x$ alloy with the rich magnetic element Mn. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 30, 21110-21119.
压力诱导的穹顶状超导性与非常规电荷密度波相变

张雨晴

中国科学技术大学物理学院

近期发现的Cu₄As₃型材料Th₂Cu₄As₅同时具有 4.2K 的超导转变和 48K 左右的电荷密度波 (CDW)转变。 这两种电子现象可能起源于不同的结构单元,为研究超导性和 CDW 之间的相互 作用提供了一个独特的平台。我们进行了高压电输运和 X 射线衍射测量,以跟踪Th₂Cu₄As₅ 的超导、CDW 和样品结构在高压下的演变情况。首先,超导转变温度随着压力下 CDW 的压制 而上升:在 CDW 完全消失时达到最大值 6.2K; CDW 消失后缓慢降低,呈现出典型的圆顶行为。 更有趣的是,当继续加压超过 8gpa 时,超导转变突然消失伴随样品电阻率和霍尔电阻率等 电输运性质的剧烈变化。单晶 X 射线衍射图像表明 8GPa 以上样品形成 2×2×5 超晶格。这 一超晶格可能是与 Cu₄As₃超导层相关的不寻常的 CDW 态,与超导的相互竞争关系导致超导的 消失。我们的研究结果揭示了压力下的多种 CDW 态,为研究多种电子有序态的相互作用提供 了一个难得的平台。

关键词: 超导,高压,电荷密度波,超结构

高压热处理温度参数对 La_{0.65}Ca_{0.25}Ba_{0.1}MnO₃ 磁性与磁热效应的 影响研究

张颖1,杨鑫2,李琦1,徐嘉伟1,马怀瑾1,金香3*,赵建军2*,马帅领4*

1. 包头师范学院物理科学与技术学院

2. 包头师范学院教师教育学院

3. 包头师范学院职业技术师范学院

4. 宁波大学物理科学与技术学院

Email: jin122120@163.com

nmzhaojianjun@126.com

mashuailing@nbu.edu.cn

金香,赵建军,马帅领为共同通讯作者

摘要:

近年来,钙钛矿型锰氧化物(La_{1-x}A_xMnO₃)因其优异的磁热性能成为磁制冷材料的研究热点。 La-Ca-Mn-O体系具有可调控的居里温度,而La-Ba-Mn-O体系因Ba²⁺较大的离子半径可拓宽相变温区。 然而,高压条件下以温度为变量的Ca/Ba 共掺杂体系的磁性、磁热效应尚未有相关研究。

本文利用高压热处理技术制备了不同温度条件 (5 Gpa; 1200 ℃、1350 ℃ 及 1500 ℃)的 La_{0.65}Ca_{0.25}Ba_{0.1}MnO₃ 多晶样品,发现 1500 ℃ 下结晶度较低,无明显特征峰,XRD 精修结果如图 1(a)-(c) 所示,样品在 1200 ℃ 和 1350 ℃ 下为 *Pnma* 的空间群。样品分别在居里温度 *T*_{C (*T*=1200℃)}≈219 K 和 *T*_C (*T*=1350℃)≈ 117 K 发生了铁磁-顺磁(FM-PM) 相变,如图 2 所示,低温区 ZFC 和 FC 出现分叉,这可能归 因于畴壁钉扎效应或不均匀铁磁和反铁磁团簇的共存现象。



图 1 (a)-(c) 高压热处理温度参数分别为 1200 °C和 1350 °C的 La0.65Ca0.25Ba0.1MnO3 的 XRD 图谱



图 2 高压热处理温度参数分别为 1200 ℃ 和 1350 ℃ 的 La_{0.65}Ca_{0.25}Ba_{0.1}MnO₃ 的热磁曲线 (*M*—*T*) (插图为 d*M*/d*T*(T) 曲线)

当外加磁场为7T时,高压样品磁熵变的最大值($|-\Delta S_M^{max}|$)分别为 $|-\Delta S_M^{max}|_{(T=1200^{\circ}C)} \approx 1.846 \text{ J·kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, $|-\Delta S_M^{max}|_{(T=1350^{\circ}C)} \approx 1.507 \text{ J·kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$,如图3(a),(b)所示,结果表明磁熵变值随着外加磁场的增大而增大, 这可能是由于样品内部磁矩排列的有序性随外加磁场的增加而增强,进而在T_C附近引起磁化强度的 增加,导致磁熵变值增大。随高压热处理温度增加, ΔT_{FWHM} 大幅展宽相比原来(1200°C制备的)展宽 了 29.5%。本研究既丰富了该类材料的物理性质,又提升了该材料磁制冷(MR)应用潜能。



图 3 (a),(b) 高压热处理温度参数分别为 1200 ℃ 和 1350 ℃ 的 La_{0.65}Ca_{0.25}Ba_{0.1}MnO₃ 的磁熵变曲线 关键词:钙钛矿锰氧化物;高压热处理;居里温度;磁热效应;相变 参考文献

- Gauvin-Ndiaye C, Tremblay A M S, Nourafkan R. Electronic and magnetic properties of the double perovskites La₂ MnRuO₆ and LaAMnFe₆ (A= Ba, Sr, Ca) and their potential for magnetic refrigeration[J]. Physical Review B, 2019, 99(12): 125110.
- Tian Y. Study on the Magnetic Properties of Double Perovskite Manganese Oxide Polycrystalline Materials[D]. Baotou Teachers' College, 2019
- Xiang J, Zhao J, Ma H J, Zhao J J, Tegus O. Magnetocaloric Effects and Critical Behavior of La_{0.7}Ca_{0.3-x}Sr_xMnO₃[J]. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2024, 37(3): 609-622.
- Li C, Zhao J J, Xing R, Yun H Q, Jin X. Critical field analysis and magnetic properties of perovskite manganese oxide La0. ₈Ca_{0.2}Mn_{1-x}Ni_xO₃ (x= 0.0, 0.1, 0.2)[J]. Chinese Journal of Physics, 2022, 77: 551-571.
- Su L. Structure, magnetism and magnetocaloric effect of perovskite oxides RFe_{1-x}Mn_xO₃ and RBaCuFeO₅ [D]. University of Chinese Academy of Sciences[J]. 2021.
- Zhao J, Jin X, Gao H Q, Ma H J, Xing R, Zhao J J. Investigation of the magnetocaloric effect and critical behavior of the perovskite La_{0.65}Ca_{0.35-x}Ba_xMnO₃ (x= 0, 0.1, 0.2, 0.3)[J]. International Journal of Modern Physics B, 2024: 2550069.



超离子冰的多场耦合相变和声子谱研究

<u>董校</u>

南开大学物理科学学院 Email: xiao.dong@nankai.edu.cn

摘要:

随着高压下的超离子冰被高压实验证实,超离子冰的物性研究成为了研究热点。我们课题组基于第 一性原理和机器学习分子动力学,对超离子冰的物理性质进行了系统性研究。最新成果有:1)超离子 冰在电场、高压和高温的共同作用下,会出现一系列与单独场作用完全不同的行为,基于这种行为我们 提出了行星条件下除行星发电机模型外的一种新的磁场产生模式;2)传统超离子冰的研究往往基于其 游离的质子部分,我们基于机器学习大时空尺度分子动力学,给出了超离子冰的声子谱,并研究了其中 的声子软化现象和声子寿命变化,将声子这一近百年的物理概念拓展至超离子态。

关键词: 超离子冰、高压下的铁电相、机器学习、超离子相声子谱、分子动力学

压力诱导的新颖结构及其超导特性

姜朋、黄红梅、李延龄

江苏师范大学物电学院,221116,江苏徐州 Email: ylli@jsnu.edu.cn

摘要:几十年来,寻找新型超导体、特别是具有高临界温度超导体的研究一直是凝聚态物理及其交叉学 科领域关注的热点问题。本报告将介绍我们近期在材料超导电性研究方面的研究进展:1)在确定 Li-Cs 体系热动力学相图的基础上,发现 Li-Cs 化合物在高压下表现出 Li→Cs 的电荷转移,Cs 的 Bader 电荷 甚至超过-3,富 Li 化合物呈现出超导特性;2)结合理论和高压实验研究了 Ti 在高压下的超导电性, 发现 Ti 在宽的压力范围内具有基本一致的超导临界温度行为,金属 Ti 在γ-δ相边界处呈现了 T。最大值 为 23.6 K,刷新了单质超导体的(当时)记录,并揭示了δ-Ti 高 T。的物理起源,这激起人们再次对单 质金属超导特性的研究兴趣;3)压力使得 LiP₁₅从准一维到二维结构转变,并展现出超导电性;4)2D 的 V₂N₃ 的超导临界温度在常压下可达 77.8 K。



图 1 (A) Li-Cs 体系的超导临界温度-压力曲线;(B) Ti 的超导临界温度-压力曲线;(C) LiP₁₅ 超导临 界温度-压力曲线;(D) Nb₂N₃ 的超导能隙与 6 种氮化物的 T_e比较示意图。

关键词: 高压, 超导, 第一性原理计算, 二维材料 参考文献

- 1. Huang, et al. Novel Topological Motifs and Superconductivity in Li-Cs System. Nano Letters 23, 5012-5018(2023).
- Liu *et al.* T_c up to 23.6 K and robust superconductivity in the transition metal δ-Ti phase at megabar pressure. Phy. Rev. B 104, 224511(2022).
- Zhang, *et al.* Pressure-tuned one- to quasi-two-dimensional structural phase transition and superconductivity in LiP₁₅. Phy. Rev. B 105(9): 094109 (2022).
- 4. Xiong, *et al.* Two-dimensional non-van der Waals niobium nitride nanosheets with high-temperature two-gap superconductivity. **Phy. Rev. B**, revised.

B-C-O 化合物硬质相的结构设计与性能研究

刘超、应盼等

江西理工大学,南京理工大学 Email: liuchao198967@126.com

摘要:

硬质材料广泛应用于工业加工和基础科学研究。设计轻量化、高硬度的新型材料具有重要意义。团 队针对 B-C-O 体系化合物的开展研究。首先丰富正交、四方等晶系 B2CO 超硬相^[1-3],开发出一种快速 实现结构模型的精准构建方法^[4],开拓了 sp³-sp²杂化共存型高硬 B₂CO 相结构体系^[2],发展了非金刚石 等电子体硬质相^[5,6](图1)。详细探究了 B-C-O 化合物的力学性质调控因素[7],揭示组分一定时,结构 类型相同且对称性相近时,材料力学性质如力学模量、硬度等相近;纯 sp³型化合物硬度高于 sp²-sp³ 杂化共存型;此外同属四方晶系 sp³杂化型的 B₂C_xO 化合物随 C 含量增加,力学模量和硬度均增大^[8]。 基于热力学形成焓与压力的关系研究, 甄别压力驱动型结构, 获取合成反应所需物相和压力, 为针对性 依托金刚石对顶砧或大腔体压机开展超高压合成提供指导。采用应力—应变模拟研究揭示 B-O 键具有弱 于 B-C 键的抗拉伸变形能力,是 B-C-O 服役过程中结构失效起源点,而处于 sp² 杂化配位环境的 O 具 有优于 sp³环境的抗拉伸变形能力^[9](图 2)。完备的研究有望提供了高效合成、安全使用等提供了依据。 关键词: B-C-O化合物; 硬度; 结构; 成分; 高压稳定性。



图 1 硬质 B-C-O 化合物的结构体系

参考文献:

- [1] Liu C., et al., Diam. Relat. Mater., 2017, 73: 87-92.
- [3] Liu C., et al., J. Mater. Sci., 2022, 57: 9231-9245.
- [5] Liu C., et al., Comp. Mater. Sci., 2018, 150: 259-264.
- [7] 刘超,应盼,高压物理学报,2021,35:061101.
- [9] Chen M., et al., Int. J. Refract. Met. Hard Mater., 2023, 111: 106086.
- [2] Chen M., et al., J. Mater. Res., 2019, 34: 3617.
- [4] Liu C., et al., RSC Adv., 2017, 7: 52192-52199.
- [6] Liu C., Ying P., Chin. Phys. B, 2022, 31: 026201.
- [8] 刘超, et al., 冶金工业出版社, 北京, 2020.

基于 CPU 并行的超高速撞击过程中产生的等离子体模拟

<u>宋卫东</u>

北京理工大学机电学院 Email: swdgh@bit.edu.cn

摘要:

开发了一种基于三维平滑粒子流体动力学(SPH)的高性能并行计算代码,采用 CPU 并行技术, 能够高效处理高达1 亿粒子的超大规模模拟。该代码用于研究铝弹体超高速撞击铝靶过程中伴随的化学 反应及等离子体生成现象。模型通过阿伦尼乌斯方程描述反应速率,将化学反应过程与撞击动态紧密耦 合,精确计算等离子体生成量。仿真结果通过经验公式验证,并提出改进的新公式。研究系统分析了不 同撞击速度和角度对等离子体生成的影响规律。此外,通过将新旧经验公式应用于航天器超高速撞击等 离子体防护设计的对比分析,验证了该代码及模型在预测撞击效应方面的准确性和实用性。CPU 并行 技术的应用显著提升了计算效率,使大规模粒子模拟成为可能,为相关领域的工程设计和科学研究提供 了强有力的工具支持。

关键词: 平滑粒子流体动力学, 数值模拟, 超高速撞击, 等离子体, 阿伦尼乌斯方程 参考文献

- Li J, Song W, Ning J. Theoretical and numerical predictions of hypervelocity impact-generated plasma[J]. Physics of Plasmas, 2014, 21(8).
- 2. Song W, Li J, Ning J. Characteristics of plasma generated by hypervelocity impact[J]. Physics of Plasmas, 2013, 20(9).

压力作用下铁的氧化还原转变以及金属元素的压致非金属化

王晓丽、李建福

烟台大学物理与电子信息学院 Email: use126126@126.com

基于第一性原理计算与 CALYPSO 结构搜索技术,系统研究了铁与 p 区元素(包括主量元素 S、Si、 P 及微量元素 Ge、As、Se、Sn、Sb、Te 等)在常压至地核压力条件下的反应活性演变规律。研究发现, 铁在高压下化学键性质发生显著改变,其氧化还原倾向发生逆转:铁从常压下的电子供体转变为地核压 力下的电子受体,氧化多数 p 区元素。这一转变使传统亲石/亲铜性元素(如 S、P、Si)在高压下呈现 强亲铁性,显著影响其在地核与地幔间的分配行为。同时,研究还表明铁与 p 区元素的结合强度与硅酸 盐地幔贫化程度呈负相关,表明高压下铁对这些元素的捕获可能是地幔贫化的重要机制。硅的独特亲和 性提示其可能优先进入地核,为核内轻元素存在提供新视角。该成果揭示了铁在极端条件下的全新化学 角色,强调其在深部地球化学演化中的核心作用,为解析地核组成与地幔异常贫化提供了关键理论依据。

以部分离子化合物为对象,系统探究了高压下 IIB 族金属碘化物、碱金属碘化物、以及碱土金属磷 化物的分解机制以及金属的非金属化。研究发现:Znl2、Cdl2、Hgl2、Ca-Te、Ag-I、Ag-Br 等体系在压 力作用下分解为单质,其中 Ca-Te 体系分解并伴随着电荷转移反转,Ca 在 651 GPa 下由金属转变为非 金属。在上述体系中,压力作用下电荷转移减少导致离子键减弱,是固体化合物分解的诱因。但是在卤 化银体系的对比研究中发现,压力引起的轨道中心下移导致的反键态的占据也会引起固体分解,这说明 压力对原子间相互作用的影响是复杂的。

关键词: 高压物理, 压致分解, 电荷转移 参考文献

 J. Li, Y. Geng, Z. Xu, P. Zhang, G. Garbarino, M. Miao, Q. Hu^{*}, and X. Wang^{*}, Mechanochemistry and the Evolution of Ionic Bonds in Dense Silver Iodide, *JACS Au* 3, 402 (2023).

2. Y. Geng, J. Li^{*}, Z. Zhang, Y. Lv, M. Lu, M. Zhu, Y. Liu, J. Yuan, Q. Hu, and X. Wang^{*}, *Downshift of d -States and the Decomposition of Silver Halides*, *Matter Radiat. Extrem.* 9, 067804 (2024).

3. Y. Lv, J. Li^{*}, Z. Zhang, Y. Geng, Z. Xu, Y. Liu, J. Yuan, Q. Wang, and X. Wang^{*}, *Reverse Charge Transfer and Decomposition in Ca–Te Compounds under High Pressure*, *PCCP*. 26, 10399 (2024).

基于双屏蔽模型修正的强关联材料宽压域物性模拟

<u>王越超^{1#}</u>、刘倍雷^{1#}、高兴誉¹、刘瑜¹、刘海风¹、宋海峰^{1*} 1 计算物理全国重点实验室,北京应用物理与计算数学研究所,北京,100094 Email: song haifeng@iapcm.ac.cn

过渡金属及镧系、锕系等具有部分填充 d/f 电子的元素是金属与陶瓷材料的关键组元。在低压条件 下,此类材料的强 d/f 电子关联效应诱导出丰富的物性异常现象,形成具有复杂量子行为的强关联体系。 当压力升高时,伴随电子关联强度的演化,材料往往经历 d/f 电子局域-巡游特性的转变,并伴随金属-绝缘体相变、晶体结构失稳等多尺度相变行为,成为高压物理研究的前沿领域。本报告采用一种基于双 屏蔽模型的自洽场修正方法,无需引入经验参数即可实现从常压至数百 GPa 高压范围内电子关联效应 的定量化描述。该方法被应用于 3d 过渡金属、4f/5f 稀土金属及其半导体材料的宽压域物性预测,揭示 了压力依赖的电子关联强度与材料物性演变的关联规律。

理论模拟获得了电子关联强度随压力变化的关系,并在此基础上对材料的冷压特征线、相变压力、 高压电子能隙等关键物性进行模拟,结果相对常规第一原理修正算法有着定量甚至定性的提升。基于对 模拟结果的分析,发现 Pr、U等典型 f 电子体系中,关联强度的压致变化通过调控 f 电子与环境电子的 杂化强度,影响了高压相结构;在 NiO、MnO 等过渡金属氧化物中,关联强度的压敏特性通过改变磁 序,导致金属-绝缘体相变的压力阈值发生偏移。

本工作论证了宽压域条件下压力依赖电子关联效应建模的必要性,同时验证了双屏蔽模型在关联体 系电子结构计算中的方法论优势。



图 1 应用于含 d/f 电子强关联材料宽压域物性模拟结果

关键词:电子强关联效应;高压物性;双屏蔽介电模型 参考文献

[1] B.-L. Liu, Y.-C. Wang*, Y. Liu et al., J. Chem. Phys., 2023, 158:084108.

[2] B.-L. Liu, Y.-C. Wang*, Y. Liu, H.-F. Liu, H.-F. Song*, J. Phys. Chem. Lett., 2023, 14:8930.

[3] B.-L. Liu, Y.-C. Wang*, X. Gao, H.-F. Liu, H.-F. Song*, Phys. Rev. B, 2025, 111:115139.

高压下富氮材料的结构设计及性质研究

姚震

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 State Key Laboratory of High Pressure and Superhard Materials, Jilin University Email: <u>yaozhen@jlu.edu.cn</u>

聚合氮是极具发展前景的新一代高能量密度材料,在军事、航空航天、储能等领域具有重要的应用 前景。高压作为一种极端条件,能够有效缩短原子间距,改变相互作用,不仅能够提高材料的晶体密度, 还能将机械能转化为化学能储存在新的化学键中,为聚合氮的制备提供了重要的途径。然而,纯氮聚合 氮合成条件极为严苛,需要百万大气压以上的超高压高温极端条件,且仅能稳定在数十万大气压以上。 针对聚合氮材料合成条件苛刻、稳定性低的科学问题,利用化学预压方法,开展了富氮材料高压结构设 计及性质研究,报道了系列形成压力温和、高稳定性的新型层状、分子筛孔道状氮聚合结构,揭示了金 属元素稳定聚合氮结构的物理机制,为实验制备新型聚合氮结构提供了理论指导。



图1 金属富氮结构

关键词: 高压物理, 聚合氮, 富氮材料, 高能量密度材料

Key Words: High-Pressure Physics, Polymeric Nitrogen, Nitrogen-Rich Materials, High Energy Density Materials

- 1. Yuanyuan Wang, et al., Inorg. Chem. 2023, 62, 11674-11681
- 2. Yuanyuan Wang, et al., Matter. Radiat. Extremes, 2023, 8, 038401
- 3. Yuanyuan Wang, et al., Sci. China. Chem. 2025, 68, 6, 2433-2440

高压下的碳材料的设计

<u>朱升财</u>

中山大学材料学院

Email: zhushc@mail.sysu.edu.cn

碳, 其独特的电子结构,可以形成 sp、sp2、sp3 杂化,结合不同的空间原子堆叠方式,导致碳具 有丰富的同素异形结构。包括 0D(零维)的富勒烯系列(如 C60、C70等),1D的碳纳米管,2D 的石 墨烯、石墨炔等,而 3D 的如常见的立方金钢石、六方金钢石、玻璃碳、以及一些更加复杂的 3D 网络 结构的碳材料。材料的成键方式决定了材料的性能,如层状的石墨(sp2键)具有超软性质,可以作为 固体润滑剂;而三维 sp3 碳结构具有超高的硬度,是最重要的超硬材料。超强的三维 sp3 键,使得金刚 石以及新型 sp3 碳材料具有超高的硬度,在加工领域具有无可比拟的优越性。随着我国制造业产业升级, 超硬材料市场需求快速增长,利用碳材料在高压下合成超硬材料,即将 sp2 碳转变为 sp3 结构碳,获得 广泛应用。众多的同素异形结构给制备 sp3 结构材料提供了丰富的原料,因此研究碳材料在高压下的相 变具有实际意义。本报告中,我将详细介绍课题组近年来在高压碳材料相变的研究进展,包含(1)石 墨到立方金刚石的相变研究,(2)石墨到六方金刚石的相变研究,(3)非晶/次晶高压形成机制等方面 的工作。本报告的内容将为金刚石硬度提升提供了新的理论依据和技术路径,同时为新型碳材料的制备 提供理论依据。



图 1 大规模分子动力学(MD)模拟研究了非等轴压缩(NIP)和等轴压(IP)条件下 C60 的结构演化 及其向非晶/次晶金刚石转变的机制。

关键词: 立方金刚石、六方金刚石、非晶、次晶 参考文献

1. Zhu S., Yan X., Liu J., A. R. Oganov, Zhu Q., Matter, 2020, 3, 864.

2. Chen G., Zhu S., Xu L., Li Y., Liu Z., Hou Y., and Mao H-k., JACS Au, 2024, 4, 3413.

3. Zhu S., Chen G., Yuan X., Cheng Y., Wan M., Xu B., Wang M., Tang H., Hou Y., J. Am. Chem. Soc., 2025, 147, 2158.

Superconductivity above 90 K at ambient pressure in Cs intercalated C₂₄ fullerene Cs₃C₂₄

高淼

宁波大学 Email: gaomiao@nbu.edu.cn

摘要:

碱金属掺杂富勒烯是一类广泛研究的超导体,例如 Cs₃C₆₀ 的超导温度接近 40 K。是否有碳的其他 类型的富勒烯展现出高温超导电性是一个值得关注的问题。C₂₄ 是尺寸较小的碳富勒烯,其代表性结构 有两类,分别拥有 D₆ 和 O_h对称性。尽管 O_h 型 C₂₄ 富勒烯的结合能较高,但它相比 D₆ 具有更大的 HOMO-LUMO 能隙,有合成的可能。我们以 O_h对称性的 C₂₄ 为原型,探索了碱金属嵌入后的超导。计 算表明 FCC 的 Cs₃C₂₄ 相比于 SC 结构能量更优,约为 448.8 meV/formula,该结构在常压下即可稳定存 在。费米能级附近的电子态主要来自未配对的 sp³杂化轨道,这些电子态与类 Jahn-Teller 畸变的声子模 式存在强耦合,超导温度超过 90 K,显著高于 Cs₃C₆₀ 的转变温度。值得一提的是,这里 O_h 型 C₂₄ 富勒 烯的结构单元与高压下合成的富氢高温超导体 CaH₆中 H₂₄笼同构,相同的结构也存在于高压下的 SrB₃C₃ 中。本研究为探索新型富勒烯高温超导体提供了借鉴。



图 1. FCC Cs₃C₂₄的晶体结构

关键词: 富勒烯, 高温超导

参考文献

- 1. Alexey Y. Ganin et al., Nat. Mater. 7, 367 (2008).
- 2. Yasuhiro Takabayashi et al., Science 323, 1585 (2009).
- 3. H. Wang et al., PNAS 109, 6463 (2012).
- 4. Li Zhu et al., Sci. Adv. 6, eaay8361 (2020).

复相图与超临界现象

叶麒俊

北京大学物理学院

摘要:

超临界区域经常被描述为状态空间中一个均一的、不存在相变的区域,但超临界物质 在不同状态下展示的不同行为规律,表明它们实际上具备不同的物理特质。这里,我们利 用李-杨理论,给出了一个描述超临界区域物性解析性质变化的数学语言。以T-P相图为例, 传统的李-杨理论把其中的一个物理量T或P从实数扩展为复数,通过李-杨零点在热力学 极限下是否可以无限靠近实轴来理解相变[1-2]。超临界区域物性的解析变化,因为不是相 变,是不能被这个语言描述的。我们将复空间中李-杨零点类比为电荷,进而将自由能类比 为一个由此分布决定的电势场。由此,我们发现无论在临界点以上或以下,物理量在真实 物理空间(两个实轴形成的平面,如T-P相图)中的解析性质均可以由这个复空间中的场 来描述。这个结论可以被两个体系(范德华模型体系与水体系)中的解析结果与数值结果 佐证。超临界区域内,这两个系统的等温压缩系数 kr (或等压膨胀系数 Cp)这种响应函数 的峰值的轨迹,与相应的复T(或复P)-空间中的最接近真实物理空间的零点在真实物理 空间的投影的轨迹几乎重合。这些结果显示超临界区域的物性变化有一种潜在的相变特质。 同时,这个扩展也使李-杨理论用一个完全统一的方式来描述相变区域与超临界区域成为可 能[3]。

参考文献:

[1] C. N. Yang and T. D. Lee, Phys. Rev. 87, 404 (1952).

[2] T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. 87, 410 (1952).

[3] X. Y. Ouyang, Q. J. Ye, and X. Z. Li, Phys. Rev. E 109, 024118 (2024)

金属镁的多相物态方程模拟与建模研究

<u>咸家伟</u>^{1,*}、李丽婷^{1,2}、崔成风^{1,2}、高兴誉¹、田付阳²、刘海风¹、宋海峰¹

¹北京应用物理与计算数学研究所 计算物理全国重点实验室,北京 100088 ²北京科技大学 应用物理研究所,北京 100083

*Email: xian_jiawei@iapcm.ac.cn

摘要:

研究金属镁的多相物态方程,对于理解极端条件下的材料相变行为以及指导材料优化设计等具有重要科学意义与应用价值。本工作开展了多类高精度第一性原理计算模拟,在此基础上通过描述固、液相的自由能,构建了金属镁的一个多相物态方程模型。其中所考虑的物相包括固相的六角密堆积(hcp)相、固相的体心立方(bcc)相、以及液相,涉及的压力-温度范围高达 600 GPa、8000 K。对于固相,采用声子准粒子方法考虑了晶格非谐振动效应对自由能的影响。此方法利用简谐声子计算,从分子动力学计算中提取非谐声子谱以及非谐自由能信息。分析表明,非谐效应使得高温下的 hcp-bcc 相变压力显著升高,在温度超过 1000 K 时升高超过 10%,在温度超过 1250 K 时升高超过 20%,从而使得 hcp-bcc相界能够与静态实验测量结果整体符合较好。对于液相自由能,利用熔化线上固、液相自由能相等的条件,基于固相自由能,并结合液相以及熔化线的模拟结果对其进行约束。其中,开展分子动力学模拟,利用固液共存法预测了 460 GPa 范围内的熔化线。熔化线计算结果在较低压力下与静态实验测量结果符合较好,在较高压力下相比于静态实验与冲击实验数据符合更好,并预测了 300 GPa 以上超高压力下的反常熔化行为。本工作预测金属镁的 hcp-bcc-液相三相点位于 25 GPa、2030 K,其压力和温度数值均高于此前基于准简谐近似的第一性原理计算结果。与其它各类静态以及冲击实验数据的系统比较分析表明,本工作基于第一性原理计算建立的多相物态方程模型总体上与实验展现出高度的一致性。关键词;金属镁,多相物态方程,第一性原理模拟,物态方程理论建模,固-固相界,熔化线

1. Liting Li, Xingyu Gao, Haifeng Liu, Jiawei Xian, Fuyang Tian, and Haifeng Song, Multiphase equation of state for magnesium based on first-principles simulations, Physical Review B 110, 224107 (2024).

 Chengfeng Cui, Jiawei Xian, Haifeng Liu, Fuyang Tian, Xingyu Gao, and Haifeng Song, Melting curve of magnesium up to 460 GPa from *ab initio* molecular dynamics simulations, Journal of Applied Physics 131, 195901 (2022).

252

高压聚合材料结构与能量特性的理论与实验研究

李楠、李修远、江崇文

北京理工大学机电学院 Email: leen04@bit.edu.cn

摘要:

气态小分子在高压下能够形成聚合相,被视为有望突破传统 CHON 含能材料能量天花板的全新高 能量密度材料,近年来在国防领域受到广泛关注。其中部分聚合相具有相对温和的合成条件并可在常压 下回收,成为了重点研究对象。我们选取代表性聚合材料,通过理论模拟和实验测试,系统和深入研究 了其聚合过程、结构特性、储能和释能机理。丰富了高压化学和含能材料等相关领域的认知,为其未来 应用提供参考。

图 1 石墨烯基材料对一氧化碳高压聚合过程的影响

关键词: 高压、聚合相、分子动力学

参考文献:

1. Li X, Peng Z, Jiang C, et al. Prog. Solid State Chem. 76, 100491 (2024).

神经网络正则变换

王磊

中国科学院物理研究所

摘要:

神经网络正则变换是一门古老技艺的现代新生。它利用生成模型参数化多体密度矩阵,并通过变分 自由能优化神经网络,从而计算有限温电子-原子体系的状态方程。在本次报告中,我将介绍神经网络 正则变换在高压氢、锂等简单物质相图中的应用,并探讨其在处理电子关联和核量子效应方面的潜力。

机器学习预测 Hubbard U 值在 FauGen 软件中的实现

王贤龙

中国科学院合肥物质院固体物理研究所 Email: xlwang@theory.issp.ac.cn

摘要:

DFT+U 是一种基于密度泛函理论(DFT)的改进方法,通过在传统 DFT 框架中引入 Hubbard U 参数来处理具有强关联相互作用的体系。然而,已有确定 U值方法如半经验式猜想、LR-cDFT 方法等面临实验值缺失、成本过高等挑战,因此难以应用在涉及到大量结构变化的计算模拟中。如何精确、快速、高效地确定 Hubbard U仍是一个长期存在的挑战。我们提出一种基于机器学习的方法,通过将结构特征指纹与线性响应约束 DFT 计算得出的 U值相关联,预测强关联体系的 U值,并发开出了 FauGen(FauGen: a Fast and Accurate Hubbard U Generator based on machine learning methods)软件,能够在秒量级给出强关联体系如 Fe_yO_x和 Mn_yO_x 化合物的 U值。该方法在预测方铁矿、赤铁矿和磁铁矿的物性方面表现出色,所得结果与实验数据或计算成本高昂的杂化泛函基准值一致。基于此框架,我们重建了 Fe_yO_x体系在 0、50 和 100 GPa 压力下的凸包图,与实验观测结果高度吻合。同时我们也将其应用到高压下 Mn_yO_x 体系结构和物性研究,澄清了之前关于 Mn-O 化物高压相变行为的争议。





关键词:强关联相互作用,DFT+U,Hubbard U值,机器学习

参考文献

- Machine Learning Model for the Prediction of Hubbard U Parameters and Its Application to Fe–O Systems, J. Chem. Theory Compu. 20, 10095 (2024).
- 2. Machine Learning-Driven Hubbard *U* for High-Throughput Study of high-pressure Manganese Oxides properties, (Submitted).

ABACUS: 一个面向大体系的高效电子结构计算工具

任新国

¹中国科学院物理研究所,北京100190 *Email: renxg@iphy.ac.cn

摘要:

ABACUS 是一款基于密度泛函理论第一性原理开源软件。它采用严格局部化的数值原子轨 道(NAO)作为基函数;这一选择有助于设计针对电子结构计算的低标度算法。本报告将 介绍最近在 ABACUS 中实现的线性标度的杂化泛函功能[2-5],及其在卤化物钙钛矿材料中 的应用[6]。此外,还将讨论团队最近在 LibRPA [7,8] 中实现的低标度无规相近似(RPA) 和 GW 算法;通过与 LibRPA 的接口, ABACUS 已经可以支持此类计算。这些算法上的 进步和基于 NAO 的高效实现,为面向大系统的高精度电子结构计算开辟了道路。

Reference:

[1] https://abacus.ustc.edu.cn

[2] P. Lin, X. Ren, and L. He, J. Phys. Chem. Lett. 11, 3082 (2020).

[3] P. Lin, X. Ren, and L. He, J. Chem. Theory Comput. 17, 222 (2021).

[4] Y. Ji, P. Lin, X. Ren, and L. He, J. Phys. Chem. A 126, 5924 (2022).

[5] P. Lin, Y. Ji, L. He, and X. Ren, J. Chem. Theory Comput. 21, 3394 (2025).

[6] Y. Ji, P. Lin, X. Ren, and L. He, Phys. Rev. Res. 6, 033172 (2024).

[7] R. Shi, P. Lin, M.-Y. Zhang, L. He, and X. Ren, Phys. Rev. B 109, 035103 (2024).

[8] R. Shi, M.-Y. Zhang, P. Lin, L. He, and X. Ren, Com. Phys. Comm. 308, 109496 (2025).

Synergistic effects of pressure and carrier injection on structural phase transition of semiconductors

Su-Huai Wei

Eastern Institute of Technology, Ningbo, China

Polymorphism is a prevalent phenomenon in nature, but controlling polymorphic transitions has not been a trivial work. For example, Ga₂O₃ possess a few polymorphs and each of them has some unique and desirable properties for a wide range of applications. Introducing carrier can sometimes stabilize one polymorph against the others: for example, injecting electrons to the conduction band can stabilize the hexagonal Ge phase. Applying pressure is another technique often used to control phase transition. Interestingly, experimental observations reveal that external pressure can induces the $\beta \rightarrow \alpha$ phase transition but not the $\beta \rightarrow \kappa$ phase transition in Ga₂O₃, despite the κ phase has lower energy compared to the α phase. However, under ion irradiation-induced carrier injection, the $\beta \rightarrow \kappa$ phase transition becomes feasible. Here using first-principles calculations, we study the phase stability and transitions of α -, β -, β , and κ -Ga₂O₃ structures. We show that the reason that pressure does not induce the $\beta \rightarrow \kappa$ phase transition is because the occurrence of the $\beta \rightarrow \alpha$ phase transition, which, due to the large volume reduction, occurs before the $\beta \rightarrow \kappa$ transition takes place. However, introducing holes into the Ga₂O₃ systems, particularly in conjunction with pressure, can stabilize the κ -Ga₂O₃ phase due to its high valence band energy. Our work, thus, offers insights into the synergistic effects of pressure and carrier injection in controlling the phase stability of crystals.

极端条件下物质元素分离的原子尺度研究

陈博1,*,曾启昱1,常晓驹,康冬冬,戴佳钰1,**

国防科技大学理学院 湖南省极端条件物理与应用重点实验室 湖南省"物态模拟与调控"基础学科研究中心 *Email: chenbochain@nudt.edu.cn, **Email: jydai@nudt.edu.cn

摘要:

极端条件下探索物质的物态物性是原子分子物理和高能密度物理的重要前沿领域,对惯性约束聚 变、天体演化、武器效应评估及国防技术发展等多个领域具有重要意义。冲击实验所产生的极端条件下, 物质会呈现高温、高压和部分电离的状态,面临时间、空间、热力学状态以及结构多维度耦合的科学挑 战。揭示这些条件下物质的动力学行为,需要发展从电子结构出发到原子间相互作用乃至更大尺度的多 尺度模拟方法。我们通过机器学习分子动力学方法,结合条件概率等分析手段,探究极端条件下物质结 构的动态演变过程。以冰巨行星及气巨行星为背景,揭示了碳氢化合物在冲击加载下出现解离-分层-形 核的三步过程,并得到了与实验一致的碳氢分层热力学区间。结合条件概率方法与基于 Jarzynski 不等 式的非平衡自由能计算手段,给出了第一性原理精度的 H/He 分层热力学相图,得到了木星和土星内部 氦雨分布区域半径,显著修正了原有的行星模型。通过这些分析方法与计算手段的发展,结合相应的物 理图景,不仅为理解动态载荷下的相变过程提供了新的途径,也为极端条件下物质的科学探索开辟了新 视角。



图1 行星条件元素分离热力学相图(a) 氢氦分离(b) 碳氢分层

关键词:极端条件;元素分离;人工智能;多尺度模拟

动态压缩下液态水的超快结冰

邓昶昊、陈博、戴佳钰

国防科技大学大学理学院物理系 Email: dengchanghao@nudt.edu.cn

摘要:

由于极端条件下水结冰的现象对于行星科学,高压物理等领域的重要意义,近年来,相关的实验与 理论研究受到广泛的关注^{1,2,3,4}。斜坡压缩作为一种先进的技术手段,可在纳秒尺度的极短时间内实现液 态水至高压冰 VII 相的快速冻结,并伴随着难以理解的相变动力学行为^{1,2}。本研究基于深度神经网络构 建的水冰模型⁵,首次以第一性原理精度的非平衡分子动力学模拟,系统地研究了亚稳液态水在斜坡压 缩下的形核及其向冰 VII 相快速冻结的过程。对相变轨迹的分析揭示了凝固界面的显著非平衡特征:存 在高度旋转和平动能力的分子层以及温度高于周围液体的晶核,这种特性促进了氢键网络在相变过程中 的重排列,从而解释了快速冻结的机制。此外,通过大量的模拟数据,我们探究了相变压强对压缩速率 和初始温度的依赖关系,建立了一个含指数因子的标度律模型。该模型能准确预测在广泛的压缩速率以 及初始温度范围内的相变压强。我们的研究表明,在超高的压缩速率下,亚稳液态水可以被驱动至一个 远超以往实验报道的亚稳态极限¹的高压状态。

关键词:行星科学,高压冰,动态压缩,相变,标度律模型 参考文献

- 1. Marshall, M. et al. Metastability of liquid water freezing into ice vii under dynamic compression. Physical Review Letters 127, 135701 (2021).
- Myint, P. C. et al. Scaling law for the onset of solidification at extreme undercooling. Physical Review Letters 131, 106101 (2023).
- 3. Millot, M. et al. Nanosecond x-ray diffraction of shock-compressed superionic water ice. Nature 569, 251–255 (2019).
- 4. Rescigno, M. et al. Observation of plastic ice vii by quasi-elastic neutron scattering. Nature 1-3 (2025).
- Zhang, L., Wang, H., Car, R. & E, W. Phase diagram of a deep potential water model. Physical review letters 126, 236001 (2021).

High pressure superconductivity in La-based ternary hydrides

<u>Ijaz Shahid¹</u>, Grebeniuk M. A², Peitao Liu¹, Xing-Qiu Chen¹

Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, 110016 Shenyang, China. Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo, 30c1 Bolshoi boulevard, Moscow, 121205, Russia. Email: shahid20b@imr.edu.cn

Abstract:

Hydrogen-rich binary and ternary structures represent a promising avenue for achieving room-temperature superconductivity under extreme pressures. However, the vast chemical space of these materials presents a significant challenge for systematic exploration. In this study, we employ the evolutionary algorithm USPEX to find new hydrides in the La-Zr-H ternary system and potentially new binary structures in Zr-H and La-H systems at pressures ranging from 150 to 300 GPa. Our results reveal several thermodynamically and dynamically stable superconducting ternary and binary hydrides, including *P-6m2*-LaZrH₁₈ with a predicted $T_c = 200-220$ K at 300 GPa, Cm-La₂ZrH₁₂, C2/m-LaZr₂H₁₂ at 250 GPa, as well as *P4/mmm*-LaZrH₇ at 150 GPa. Additionally, we identify novel binary hydrides within the LaH and ZrH systems, such as *R3m*-Zr₂H₁₇ ($T_c = 200-224$ K at 300 GPa), C2/m-La₄H₁₇, Immm-La₃H₈, and Cmmm-Zr₃H₁₄ at 150 GPa. These findings underscore the potential of La-based ternary hydrides as high-Tc superconductors under extreme compression and provide valuable insights for the design and synthesis of next-generation high-temperature superconducting materials.

Key Words: Density Functional Theory (DFT), Hydrogen-Rich Hydrides, Evolutionary Algorithm (USPEX), High-Pressure Superconductivity

固态氢在纳米限域中的相行为调控与金属化趋势

<u>李聪</u>^{1,2}, Howard Sheng¹

¹北京高压科学研究中心 ²苏州科技大学物理科学与技术学院 Email: cong.li@hpstar.ac.cn

摘要:金属氢因其潜在的室温超导、超流等极端物理性质,被誉为高压物理学中的"圣杯", 其实现将对能源、航天及基础物理研究带来颠覆性影响。然而,固态氢金属化压力极高,这 严重制约了其实验实现及潜在应用。为此,开发降低其金属化压力的有效策略成为当前研究 热点。本研究提出了一种基于纳米限域效应的新方法,通过将氢分子限域在纳米尺度的空腔 或孔道中,引入强烈的界面作用和空间约束,调控其分子堆积方式及电子结构行为。通过第 一性原理分子动力学模拟,我们发现纳米限域效应显著改变了氢分子的和振动模式,拉曼与 红外光谱中主振动峰出现明显软化,这是由于界面氢分子无序度增加、氢键键长增长以及分 子间耦合增强等结构特征。与此同时,限域效应引发了电子结构显著变化,表现为能带带隙 减小,表明固态氢的金属化可望在远低于体相条件下实现。这些发现不仅为理解纳米限域环 境下轻元素分子的结构和电子行为提供了重要物理图像,也为实现可控压力下的金属氢合成 提供了可行路径,具有重要的理论意义和潜在应用价值。

关键词:固态氢;纳米限域;高压;金属化

压力诱导电子化合物中的超导和磁性性质

丁驰、鲁清、孙建

南京大学物理学院 Email: chiding@nju.edu.cn

摘要:

近年来,电子化合物得到了越来越多的关注。间隙电子的出现诱导了包括磁性,超导和拓扑物态在 内的多种新奇物性,具有广泛的应用前景。另一方面,电声耦合和电子关联是凝聚态物理学的两个重要 研究方向。电子化合物中的间隙电子和晶格的耦合与常规体系有较大不同,其关联效应也迥异于常规材 料。

在此报告中,我将介绍多种电子化合物体系中的超导和磁性性质,分别揭示其和间隙电子的关系。 包括钾氨电子化合物中的自旋-派尔斯(Peierls)相变行为、锗化钙中的一维超导电子化合物、以及若干磁 性和超导相变行为。以钾氨电子化合物为例,我们预言在 K(NH₃)2的层间存在局域化的间隙电子,并形 成准二维的三角晶格。该材料的能带范霍夫奇点随着压力的增加逐渐向费米能级移动,诱导出晶格和局 域电子的双重失稳。这种失稳又导致间隙电子的二聚化,并表现出锯齿型反铁磁态。磁性和派尔斯相变 不仅可以共存,而且可以相互助益,间隙电子的局域磁性在此起了非常关键的作用。上述工作为研究量 子材料中电荷、自旋和声子之间的相互作用提供了重要启示。



图1 范霍夫奇点、声子失稳、晶格二聚化。间隙电子的锯齿形反铁磁态,能带结构和焓值图 关键词:电子化合物、超导、磁性相变、自旋-派尔斯相变 参考文献

- 1. Chi Ding, Zhongwei Zhang, Qing Lu, ..., and Jian Sun*, Phys. Rev. B 111,104113 (2025)
- 2. Chi Ding, Qing Lu, Zhaopeng Guo, ..., and Jian Sun*, Sci. Bull. 69, 1027-1036 (2024).

层状碱金属和碱土金属硼氢化物高温超导体的理论设计

郝玲娟

邯郸学院机电学院 Email: ysuhaolingjuan@163.com

摘要:

在第一性原理计算的基础上,我们通过利用 H 原子代替层状六方 Li₃B₂ (h-Li₃B₂) 结构中的部分 Li 原子,提出了一种在 20 GPa 下动力学稳定的层状六方 Li₂B₂H (h-Li₂B₂H) 新结构^[1]。h-Li₃B₂和 h-Li₂B₂H 结构的能带结构中存在的准 2D 特征与 MgB₂ 的能带结构中显示的准 2D 特征一致,从而表现出潜在的 超导性。与 h-Li₃B₂相比,由于 Li_p 电子向 B 原子杂化轨道的贡献减少,h-Li₂B₂H 中的σ和π键具有明显 的能量增强。EPC 计算结果表明,层状 h-Li₃B₂和 h-Li₂B₂H 结构在 20 GPa 下的超导临界温度分别为 2 K (λ =0.39) 和 28 K (λ =0.81)。在 h-Li₂B₂H 结构中,H 原子质量小,具有很强的振动能,并且通过与 Li 原子键合可以增强 B 原子σ和π键的能量,这对增强电声耦合和超导性起着至关重要的作用。因此, H 原子层的引入可能会对层状碱金属和碱土金属硼化物的超导电性产生积极影响。随后,通过替换六方 层状结构 Li₂B₂H 的金属元素,我们提出了一种在常压下即可展现二维超导性的新型能量亚稳态六方 Na₂B₂H 结构^[2]和一种在常压下具有能量稳定性的新型六方 Mg₂B₂H 结构^[3]。电声耦合计算表明,Na₂B₂H 的超导转变温度为 42.4 K (λ =1.73), Mg₂B₂H 超导临界温度为 26.2 K (λ =0.84)。



图 1 在 20 GPa 下的晶体结构示意图: h-Li₃B₂ (a), h-Li₂B₂H (b), h-LiB₂H₂ (c) 和沿[001]方向的硼原

子晶格(d)

关键词:第一性原理计算;晶体结构;电子性质;电声耦合参考文献

 Lingjuan Hao, Xiaochuan Li, Yang Zhang, Kun Luo, Yufei Gao, Zhikang Yuan, Feifei Ling, Zhisheng Zhao, Dongli Yu. Electronic structure and superconductivity in hexagonal Li₃B₂ and Li₂B₂H phases under pressure[J]. Journal of Applied Physics, 2019, 125 (22): 223902.

钒和铌的高压熔化与弹性性质:基于密度泛函理论与机器学习势的 研究

王豪

中国工程物理研究院流体物理研究所 Email: wh 95@qq.com

摘要:

在高压力条件下,VB族过渡金属钒(V)和铌(Nb)虽然晶体结构简单,却展现出复杂的物理行为,如反常的压缩致软化-加热致硬化现象(CISHIH)。本研究采用第一性原理和机器学习势分子动力学方法,系统探究了高压下V和Nb的熔化及异常力学软化-硬化行为。与V不同,Nb的熔化行为显著超出当前理论与实验结果,首次报道了Nb的冲击熔化区间。等温等压分子动力学模拟显示,Nb的Pnma相在高温下容易力学失稳退回至bcc相。此外,在0-250 GPa压力范围内应用分子动力学研究了V和Nb随温度变化的异常弹性性质:与QHA计算结果不同,原子的热位移取代热电子效应成为钒铌热致硬化的主要因素;两种金属的力学行为均从热致硬化转变为热致软化,揭示了热膨胀致软化与热致硬化之间的竞争机制。研究工作不仅深化了对高压下V和Nb物理性质的理解,也为研究其他金属的高压物理性质提供了有价值的参考。



图 1. 金属钒铌声速随压力温度的变化。

关键词: 钒铌; 熔化; 弹性性质; 机器学习势; 高温高压

寻找和设计兼具 Kagome 晶格的新型硬质高温超导体

王新伟、李亮、段德芳、田夫波*

吉林大学物理学院 Email: tianfb@jlu.edu.cn

摘要:

研究兼具 Kagome 晶格结构、硬质属性以及高温超导特性的多功能结构材料,是当前材料科学和凝 聚态物理的前沿课题。Kagome 晶格因其独特的几何结构,可在电子行为上表现出丰富而复杂的物理现 象,如 Dirac 锥、范霍夫奇点以及平带;其中 Dirac 锥提供非平凡拓扑的可能¹,平带的色散导致态密度 的显著峰2, 范霍夫奇点呈现高密度的发散电子态3, 这些特性对于实现高温超导具有潜在的重要意义。 因此,对 Kagome 晶格材料展开理论预测和实验研究,以期实现更高效、更稳定的高温超导应用。我们 利用晶体结构预测技术和第一性原理计算方法,在压力为 0、25 和 50 GPa 下对 Na_xSi_y (x = 1-3; y = 1-3) 化合物的晶体结构展开了系统预测,并从高配位结构和二维层状讨论了其晶体特征,其中 Na₃Si Pm-3m 相呈现 0D 电子化合物的特征。在 XY3 P6/mmm (X = Li, Na, Cs; Y = B, Si, Ge)体系中,其能带和态密度的 结果表明具有多重 Dirac 锥和范霍夫奇点、费米能级处的电子主要由形成 Kagome 晶格的 B、Si 和 Ge 原子贡献;并且发现 Kagome 晶格中的层与层之间的 B-B、Si-Si、Ge-Ge 原子之间存在三种情况: (1) B-B 之间的"隔离带"; (2) Si-Si 之间的共价键; (3) Ge-Ge 之间的金属键。随着压力的升高, XY3 体系的 T。 呈现降低的趋势;其中 CsB₃的 T_{c} 为 30.54 K,在 0 GPa 下表现出高 T_{c} 的重要原因在于 Kagome 晶格内 B、Si和Ge原子在费米能级处态密度的主导贡献、以及B、Si、Ge原子分别在xy和z平面内的强烈振 动和声子软化,这些现象增强了其电声耦合强度,这些结果充分证明了 XY3 体系中 Kagome 晶格对其超 导电性的作用。根据 XY3 体系在 0-15 GPa 的弹性常数,发现 NaSi3 的维氏硬度最高且为 30.75 GPa。高 温超导体和硬质材料之间既有相互竞争(如 LiSi3、LiGe3、NaGe3、CsB3)也有可能共存(如 NaSi3、LiB3、 NaB3)。最后,基于深度学习分子动力学模拟,采用均方根位移、径向分布函数、原子运动轨迹确定了 NaSi3的熔化温度为 608 K。通过对 XY3 P6/mmm 体系的稳定结构、超导电性、维氏硬度、以及熔化行 为的全面探讨,我们的结果表明在 XY3 P6/mmm 体系中凭借独特的 Kagome 晶格结构可以实现高温超导 电性、硬质特性、耐高温性质的共存,从而为实验探索合成新型硬质高温超导体提供理论指导。



图 1 在 XY₃ (X = Li, Na, Cs; Y = B, Si, Ge)体系中,通过分析 P6/mmm 相的晶体结构和 Kagome 晶格原子 层之间的成键方式将 X 和 Y 原子划分为金属+金属、金属+非金属两大类,并且得到了 XY₃体系中能带 拓扑性质、超导电性、维氏硬度以及熔化温度随着压力的演变趋势。

关键词: Kagome 晶格,硬质超导体,熔化温度,温度-压力相图,深度学习分子动力学模拟

参考文献

- H. Zhou, H. Liu, H. Ji, X. Li, S. Meng, J.-T. Sun, Orbital degree of freedom induced multiple sets of second-order topological states in two-dimensional breathing Kagome crystals, npj Quantum Materials 8(1) (2023).
- 2. H.M. Guo, M. Franz, Topological insulator on the kagome lattice, Physical Review B 80(11) (2009).
- Z. Jiang, Z. Liu, H. Ma, W. Xia, Z. Liu, J. Liu, S. Cho, Y. Yang, J. Ding, J. Liu, Z. Huang, Y. Qiao, J. Shen, W. Jing, X. Liu, J. Liu, Y. Guo, D. Shen, Flat bands, non-trivial band topology and rotation symmetry breaking in layered kagome-lattice RbTi3Bi5, Nature communications 14(1) (2023).

高压下 Lu-S 化合物超导结构预测

吴珏霏、朱邦帅、丁驰、邵德喜、裴翠颖、王琦、孙建*、齐彦鹏*

上海科技大学物质科学与技术学院

Email: wujf@shanghaitech.edu.cn

摘要:

结合第一性原理计算与晶体结构搜索程序 MAGUS,我们在 200 GPa 的压强范围内,预测了 7 种 Lu-S 的新奇化学配比与 15 种新型结构,10 种新型结构具有超导电性。其中,LuS₆-C2/m 在 70 GPa 下 的理论 *T_c*~21.9 K,LuS₆-*R*-3m 在 90 GPa 下的理论 *T_c*~25.3 K,在理论上提高了过渡金属硫化物的超导转 变温度记录。综合对比预测的超导结构,富含硫元素且具有笼型结构的 Lu-S 化合物具有较高的超导转 变温度,为后续超导的过渡金属硫化物新型结构设计提供了参考。值得一提的是,超导的新型结构 LuS₂-*Cmca* 在 60 GPa 下的 *T_c*~9 K,费米面附近的交叠能带在 Brillouin 空间形成了节点王冠,表现出能 带拓扑特性;结合声子谱的二维扫描与声子 Hamiltonian 构建发现了四条具有平带性质的声子节点线。 为研究超导电性、拓扑性质的联系提供了潜在的平台。我们的研究丰富了过渡金属硫化物的高压相图, 为过渡金属硫化物新型超导结构的研究提供了参考和方向¹。





关键词: 高压、晶体结构预测、第一性原理计算、超导物性、拓扑物性参考文献(中文小五号宋体, 其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

1. <u>Wu J.</u>; Zhu B.; Ding C.; Shao D.; Pei C.; Wang Q.; Sun J.; Qi Y., Enhancement of superconducting transition temperature and exotic stoichiometries in Lu-S system under high pressure. *Phys. Rev. Res.* 6, 023177 (2024).

高温高压条件下氢对碳酸盐结构和物性的影响

吴旻

浙江工业大学材料科学与工程学院

摘要:

深入研究地球内部物质结构和物性具有重大的科学意义。同时地球的物质循环对人类有 着至关重要的影响,这其中最受关注的为碳循环和水循环。碳在地球内部主要以碳酸盐的形 式存在,能够通过火山喷发或分解释放二氧化碳的形式回到地球表面;此外,研究表明岩石 能以各种方式抓住水并通过板块俯冲将大量的水带入地球内部。因此研究含氢碳酸盐矿物在 极端条件下的结构和物性,有助于深化我们对地球内部结构及动力学过程的理解,也利于我 们对地球水循环和碳循环的认识。本论文通过第一性原理分子动力学计算方法研究了氢在地 球内部高温高压极端条件下对碳酸盐、二氧化碳等矿物结构和物性的影响。研究结果发现在 氢的作用下,高温高压条件下的碳酸盐和二氧化碳结构中都产生了一定程度的碳原子聚集, 这可能是形成金刚石的前驱体。这为我们解释地球内部金刚石的形成原因提供了一定的理论 基础。

宽温压域下关联电子体系基础物性模拟方法发展

徐远骥

北京科技大学,数理学院 Email: yuanjixu@ustb.edu.cn

摘要:

稀土等其它关联电子材料在宽温压域下具有重要的实际应用价值。然而在宽温压域下,与其电子相关的局域-巡游二重性将会对体系的基础物性产生重要影响。在本工作中,我们发展了交互友好型的宽温压域集成处理程序 HSCM,并对 Ce、Yb 等金属单质进行了宽温、压域下电子结构与物态方程的模拟。同时在物理机理方面,我们以 *d*-电子关联体系中存在的局域-巡游二重性为核心,提出了可以较好理解巡游磁性体系磁转变的动态关联模型,该模型今后将被在*f*电子磁性体系中做进一步的发展。

关键词:关联电子体系,密度泛函理论,动力学平均场,磁性,局域-巡游二重性

参考文献

- Min Liu and Yuanji Xu. Stress-induced multiple quantum phase transitions in the B1 and B2 phases of CeN. Phys. Rev. B 109, 125114 (2024).
- 2. 陈凯乐,王越超,徐远骥等.锡的多相物态方程第一性原理计算研究.高压物理学报. DOI:10.11858/gywlxb.20251054.
- Yuanji Xu, Yuechao Wang, Xintao Jin, et al. Mechanism of magnetic phase transition in correlated magnetic metal: insight into itinerant ferromagnet Fe₃₋₆GeTe₂. Commun. Phys. 7, 381 (2024).
- 4. Yuanji Xu ,Xintao Jin, Jiacheng Xiang, Huiyuan Zhan and Fuyang Tian. DFT+DMFT investigation of the magnetic phase transition in the itinerant ferromagnet Fe₃GaTe₂. Phys. Rev. B 111, 155142 (2025).

高压电子化合物超导体的理论研究

张孝华,杨国春*

理学院, 燕山大学, 河北省秦皇岛 066004

*邮箱: yanggc468@nenu.edu.cn; yanggc@ysu.edu.cn

电子化合物是具有间隙电子电荷浓度和拓扑形态相关材料性质的量子材料,近年来 受到广泛关注。作为新型超导材料,电子化合物超导体的电荷转移与间隙电子相关的超 导电性对于深化经典物理和拓展电声耦合机制具有重要意义。本研究提出利用电负性适 中元素调控高压下锂(Li)电子分布,设计了系列富Li组分的电子化合物超导体,探 讨了其电荷转移机制和超导起源。我们设计了哑铃状连通间隙电子的Li₆P^[1]和 p 轨道孤 立间隙电子的Li₈Au[2],分别将超导温度提高至麦克米兰极限和液氮温区;预测了Li₆ 八面体局域间隙电子形态的LinTe/LinSe 超导电子化合物[3],揭示了新角度的间隙电子 理解;并通过分析不同Li基电子化合物,建立了间隙电子对增强电声耦合和超导电性 的关系[4,5]。

参考文献:

- Ziyuan Zhao, Shoutao Zhang, Tong Yu, Haiyang Xu, Aitor Bergara, and Guochun Yang, Predicted Pressure-Induced Superconducting Transition in Electride Li₆P, Phys. Rev. Lett. 2019, 122, 097002.
- [2] Xiaohua Zhang, Yansun Yao, Shicong Ding, Aitor Bergara, Fei Li, Yong Liu, Xiang-Feng Zhou, and Guochun Yang, Superconductivity in Li₈Au electride, Phys. Rev. B 2023, 107, L100501.

[3] Xiaohua Zhang, Fei Li, Aitor Bergara, and Guochun Yang. Pressure-induced superconductivity in Li-Te electrides. **Phys. Rev. B** 2021, 104, 134505.

[4] Yaping Zhao, Aitor Bergara, Xiaohua Zhang, Fei Li, Yong Liu, and Guochun Yang. Interstitial anionic electrons favoring superconductivity in Li-As electrides. **Phys. Rev. B** 2023, 108, 104505.

[5] Zixuan Guo, Aitor Bergara, Xiaohua Zhang, Xing Li, Shicong Ding, and Guochun Yang. Superconductivity in Li_8H_n electrides: The effect of interstitial anionic electrons on electron-phonon coupling. **Phys. Rev. B** 2024, 109, 13450.

行星内部条件下热输运的声子非简谐效应

余晓翔、杨凤虎、邱荣、戴佳钰

¹国防科技大学,理学院,长沙 410073,中国 ²国防科技大学,极端条件物理及应用湖南省重点实验室,长沙 410073,中国 ³国防科技大学,湖南省物态模拟与调控基础学科研究中心,长沙 410073,中国 Email: xxyu@nudt.edu.cn

摘要:

高温高压下的热输运研究对天体物理、国防领域具有重要意义[1-3]。相比于常温常压,高温高压下 物质的声子性质呈现显著的变化,从而导致奇异的热输运行为[4,5]。许多物理效应不可忽略,例如声子 重整化[6]、高阶声子散射[7]、声子波粒二象性[8]等,使得极端条件下热输运的准确计算极具挑战。最 近,我们针对几类典型体系,发展了宽温度压强区间的第一性原理精度机器学习势函数[9,10],通过分 子动力学模拟来考虑上述物理效应,对原子运动演化过程进行模拟,发现了一系列新奇的热输运机理, 例如硅酸镁中声子粒子图像部分失效[11]、冰超离子态相变诱导的反常热输运[12]、冰中氢键网络主导 的多样化声子输运[13]、氧化镁中多声子散射的竞争机制[14]、温稠密铝中离子热导率的非平衡效应[15] 等。可以看出,极端条件下物质的热输运现象极为丰富,仍有待进一步探索,而基于机器学习势函数的 分子动力学方法是研究极端条件热输运的有力工具。

关键词:极端条件,声子,热输运,机器学习,分子动力学 参考文献

- 1. Z. Konôpková et al., Nature 534, 99 (2016).
- 2. T. Lay et al., Nat. Geosci. 1, 25 (2008).
- 3. H. Dekura et al., Phys. Rev. Lett. 110, 025904 (2013).
- 4. Y. Zhou et al., Nat. Rev. Phys. 4, 319 (2022).
- 5. S. Li et al., Nature 612, 459 (2022).
- 6. C. Kwon et al., Phys. Rev. B 102, 184309 (2020).
- 7. N. K. Ravichandran and D. Broido, Nat. Commun. 10, 827 (2019).
- 8. D.-B. Zhang et al., Phys. Rev. B 96, 100302 (2017).
- 9. L. Zhang et al., Phys. Rev. Lett. 120, 143001 (2018).
- 10. J. Han et al., Nanomaterials 13, 1576 (2023).
- 11. F. Yang et al., Chin. Phys. Lett. 39, 116301 (2022).
- 12. R. Qiu et al., Chin. Phys. Lett. 40, 116301 (2023).
- 13. R. Qiu et al., Hydrogen-bond-network-governed thermal transport in ice polymorphs. (Submitted)
- 14. R. Qiu et al., Phys. Rev. B 111, 064103 (2025).
- 15. Q. Zeng et al., Phys. Rev. Res. 3, 033116 (2021).

高压电子化合物超导体的理论设计与性质研究

张孝华、杨国春*

燕山大学理学院 Email: yanggc468@nenu.edu.cn

摘要:

电子化合物是一种部分价电子脱离原子轨道而局域在晶格间隙的量子材料,具有间隙电子电荷浓度 和拓扑形态密切相关的材料性质,受到化学、物理和材料等领域广泛关注。电子化合物超导体作为一种 新型超导材料,其非同寻常的电荷转移与间隙电子相关的超导电性对于加深经典化学认知和拓展电声耦 合机制具有重要研究意义。

聚焦探寻新型电子化合物超导体,我们在借助电负性适中元素强的电荷调控能力调制高压下锂(Li) 电子分布预测了系列富 Li 组分电子化合物超导体(如 Li₆P^[1], Li₆As^[2], Li₉Te^[3]等)后,最近,我们基 于 Li 的简单立方单元,采用 Au 面心立方框架约束和 H 原子填充两种方法在高压下设计了不同结构的 高对称性立方 Li 基电子化合物 Li₈Au^[4]和 Li₈H_n (n = 7-4)^[5],将电子化合物超导转变温度提升至液氮沸点 附近;同时,通过探究间隙电子电荷量对超导电性的影响,建立了间隙电子与 Li 原子相互作用,增强 电声耦合,贡献超导电性的重要关系。我们的工作为电子化合物超导电性研究提供了重要见解,有力促 进了电子化合物超导体的发展。



图1 电子化合物超导体发展历程(我们提出的电子化合物用红色星号表示)。

关键词: 高压; 电子化合物; 超导; 电子结构; 第一性原理计算 参考文献

[1] Zhao, Z.; Zhang, S.; Yu, T.; Xu, H.; Bergara, A.; Yang, G. Phys. Rev. Lett. 2019, 122: 097002.

[2] Zhao, Y.; Bergara, A.; Zhang, X.; Li, F.; Liu, Y.; Yang, G. Phys. Rev. B 2023, 108: 104505.

[3] Zhang, X.; Li, F.; Bergara, A.; Yang, G. Phys. Rev. B 2021, 104: 134505.

[4] Zhang, X.; Yao, Y.; Ding, S.; Bergara, A.; Li, F.; Liu, Y.; Zhou, X.-F.; Yang, G. Phys. Rev. B 2023, 107: L100501.

[5] Guo, Z.; Bergara, A.; Zhang, X.; Li, X.; Ding, S.; Yang, G. Phys. Rev. B 2024, 109, 134505.

高压下高温超导三元氢化物的理论预测

朱邦帅、邵德喜、裴翠颖、王琦、吴珏霏、齐彦鹏

上海科技大学物质学院 Email: zhubsh2022@shanghaitech.edu.cn

摘要:

实现室温超导性是凝聚态物理领域的终极目标之一。受到"化学预压缩"理论的启发,压力下的富 氢化合物得到了广泛的研究,并成为追求室温超导性的潜在材料。与二元氢化物相比,三元氢化物的研 究更具挑战性。从实验方面来看,适当的元素选择和特定的合成条件需要消耗大量的实验资源。在理论 模拟方面,虽然理论模拟可以大大降低实验成本,但对整个三元相图的计算非常昂贵且耗时。因此,三 元氢化物的理论研究往往需要一定的策略。基于先前的研究成果,可以总结出两条在高压下获得独特三 元氢化物的策略。其中一种策略是在高压下结合两种已知的超导二元氢化物,另一种策略是基于结构设 计进行元素替换。

在此研究中,作者在五个已报道的原型结构中使用 16 种金属元素进行元素替换,构建出了 115 种 三元氢化物并采用了"三步法"来依次从动力学稳定性、形成能和相对焓方面对候选结构进行筛选和研 究。基于这种方法,在 *P-3m*1 的空间群中发现了三种具有氢笼形结构的亚稳态化合物,包括 Y₂CdH₁₈、 Y₂InH₁₈和 Ca₂SnH₁₈。所有结构在高压下都具有超过 110 K 的超导性。此外,通过将键合因子与其他 12 种已报道的三元氢化物体系进行比较,提出了仅用键合强度来评估稳定压力是有局限性的,而 H-H 键 合强度可以为 *T*。值预测提供前景。这项研究丰富了高压下新型三元氢化物的数据库,并为三元氢化物 设计考虑比 I B、II B 和 III A 元素或*f*电子元素更具活性的元素提供了见解,对未来的理论和实验研究 具有指导意义。

273
压力诱导三元 Xe-C-O 超价化合物中 Xe 配位数的增加

朱金铭、包括*、崔田

吉林大学物理学院,宁波大学物理科学与技术学院 Email: baokuo@jlu.edu.cn

摘要:

氙气作为稀有气体,在极端条件下表现出复杂的化学行为。高压下形成的超价氙化物有助于揭示 Xe 的物理化学本质,为"氙气的消失之谜"[1]提供可能的解释。本研究基于第一性原理计算[2],构建 了三元 Xe-C-O 体系的高压相图,发现了两种稳定的超价化合物——四方的 *I*4-XeCO₄和六方的 *P*63*mc*-Xe₂CO₄。随着压力升高,Xe 原子的配位数由4增加至16。在XeCO₄中,4配位的Xe 原子遵循 典型的三中心四电子键;在Xe₂CO₄中,压力诱导16配位的Xe²⁺原子发生*sp*³杂化,Xe 的半充满的反 键轨道与CO₄单元中O的非键轨道重叠,使超价化合物呈金属性。高温-高压相图表明,这两种化合物 在对应地幔深部条件下保持为固态,表明氙气可能被捕捉在地核内部。本研究揭示了超价氙化物的键合 机制,为理解氙在地球内部以氧化物形式储存,以及对稀有气体化学和地球演化过程提供了理论支持。





关键词: 高压, 下地幔, 氙化物, 超价化合物

- 1. M. Ozima and F. A. Podosek, Journal of Geophysical Research: Solid Earth 104, 25493 (1999).
- 2. W. Kohn and L. J. Sham, Physical Review 140, A1133 (1965).

B1 相碳化硅宽温压区间机器学习势函数

罗朝波 1,2、余晓翔 1,*、曾启昱 1、陈博 1、康冬冬 1、彭向阳 2、戴佳钰 1,*

1.国防科技大学理学院 长沙 410073
2.湘潭大学物理与光电工程学院 湘潭 411105
Email: xxyu@nudt.edu.cn, jydai@nudt.edu.cn

摘要:

常温常压下的碳化硅存在 2H、3C、4H、6H 和 21R 等多种相结构,高压下则主要为氯化钠结构的 B1 相。加压至 60~80 GPa 时常温常压相碳化硅可转变为 B1-SiC^[1],B1-SiC 可能主要存在于系外富碳行 星中^[2],目前对其性质的研究还较少。本文以 B1 相碳化硅为研究对象,基于第一性原理计算获得精确 的数据集,利用 DeePMD-kit^[3]和 DP-GEN^[4]多次迭代训练、拓展温度压力区间,获得 B1-SiC 在 4000K 以下 0-500 GPa 的宽区间机器学习势函数。并对其声子谱、状态方程等物性进行了验证,表明该势函数 在宽热力学区间达到第一性原理精度,且与实验结果^[5]符合良好。基于机器学习势函数的深度势能分子 动力学具备高精度、高计算效率的特点,我们将进一步利用深度势能分子动力学研究其热导率和相变等,为深入研究高压下碳化硅提供理论参考。



图 1 基于机器学习势函数计算的声子谱(a)与状态方程(b)与 DFT 计算结果及实验结果[5]对比图

关键词: 高压相、碳化硅、机器学习、深度势能分子动力学

参考文献

1.Daviau K, Lee K K M 2018, Crystals, 8(5): 217

2.Nisr C, Meng Y, Macdowell A, et al. 2017, Journal of Geophysical Research: Planets, 122(1): 124-133

3.Zeng J, Zhang D, Peng A, et al. 2025, Journal of Chemical Theory and Computation, 21(9): 4375-4385

4. Zhang Y, Wang H, Chen W, et al. 2020, Computer Physics Communications, 253: 107206

5. Miozzi F, Morard G, Antonangeli D, et al. 2018, Journal of Geophysical Research: Planets, 123(9): 2295-2309

Y-Cl 体系中的拓扑电子化合物

<u>梁贻玮</u>、林心演,万彪,郭照芃,曹徐岩,邵德喜*,孙建*,缑慧阳* 北京高压科学研究中心,北京,100193,中国 Email: huiyang.gou@hpstar.ac.cn

摘要: 拓扑电子化合物不仅是研究 Dirac、Weyl 费米子及其它准粒子的良好平台,而且还具有如低功函数、高电导率、高电子迁移率等丰富的物理化学性质,受到了人们广泛的关注。受具有非平凡拓扑结构的电子化合物 YCl 和 Y₂Cl₃ 的合成所激励,我们探索了 1-100 GPa 压力范围下的 Y-Cl 二元体系。基于第一性原理计算和晶体结构预测技术,我们发现具有 P4/nmm 空间群的 YCl 相(命名为 t-YCl)在热力学和晶格动力学上是稳定的,并且可以保留至环境条件下。基于 k·p 方法和不可约表示分析发现,t-YCl 在无自旋轨道耦合(SOC)的布里渊区(BZ)中围绕 Z 点存在拓扑节点链,其在考虑 SOC 时演化为具有两个 Dirac 点的 R_{4z}对称保护的 Dirac 半金属相。此外,基于能带表示(BR)分析,我们发现占据最高的能带属于 A1@2a BR。由于 Y 原子和 Cl 原子都位于 2c Wyckoff 位置,即 t-YCl 系统中没有原子位于 2a Wyckoff 位置,这表明在 2a Wyckoff 位置存在非补偿态的非常规性质。考虑到离子化合物的性质,非常规的 t-YCl 相具有成为电子化合物材料的巨大潜力,我们的电子局域密度函数(ELF)计算进一步验证了这一点,其 2a Wyckoff 位置的无补偿状态由间隙电子(ISQ)贡献。我们的工作为研究压致拓扑电子态提供了良好的理论和实验平台。



图 1. t-YCl 的(a)轨道投影能带和分波态密度及(b) ELF 分析图。

关键词: 高压, 电子化合物, 非常规拓扑

属锡的冲击动力学特性初步模拟

耿华运

流体物理研究所,冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室,四川绵阳

摘要:

冲击现象在宇宙中普遍存在,但其机理与影响的深入理解仍面临重大挑战。在凝聚态物理与力学领域,如何准确描述和预测材料在冲击条件下的动态行为始终是核心难题。这一挑战因多种物理过程的相互耦合(如断裂与相变)而愈加复杂——大多数不可控与不可预测的力学失效现象,都不同程度地关联于这些耦合过程。因此,建立冲击加载下材料的预测能力具有十分重要的科学意义。本报告将以金属锡为研究对象,展示我们在此目标上的研究进展。锡作为高压物理领域被广泛研究的金属之一,其压缩过程中的β-γ相变已被广泛知晓,尽管研究历史悠长,但对其在复杂加载下动力学特性的系统性认知仍存在空白。例如,虽然锡不属于强关联材料,但采用密度泛函理论(DFT)等第一性原理方法对其进行精确理论描述仍面临显著挑战,这种局限性促使研究重点转向实验数据驱动的研究范式。在本报告中,通过整合静态压缩、斜坡压缩和冲击压缩等多维度实验数据,结合先进材料模型构建,我们展示了在极端加载条件下(表现为大变形、相变与断裂过程的多物理场耦合,至少在一维情形下)对锡材料的冲击动态响应进行定量描述与模拟仿真的可行性。研究表明,通过进一步融合基础物理机制,有望实现具有实用价值的材料动力学预测能力。该研究模式不仅深化了对极端条件下锡材料行为的理解,更为类似条件下其它材料的研究提供了可参考的处理框架。

中等压强下电子化合物Na₆C的超导电性和超离子态行为

王畅、刘鹏叶、张道远、魏延亮、崔田、刘召

宁波大学 物理科学与技术学院 Email: <u>2211690041@nbu.edu.cn</u>

摘要:

近年来,我们成功地预测了在0-60 GPa中等压力范围内的三维电子化合物Na₆C,并展示了其潜在的合成路径。结合第一性原理计算,我们提出的C2/m-Na₆C电子化合物在中等压力下表现出多种性质,包括三维间隙电子态、超导态和超离子态行为。其中C2/m-Na₆C的结构动力学稳定性受到离子和共价键的协同作用的显著影响。电声耦合主要归因于体系低频声子散射占据在Na和C中sp杂化轨道上的电子,而三维(3D)间隙电子态的存在对超导电性没有显著的贡献,导致30 GPa下T_c仅为0.051 K。我们的分子动力学模拟表明,在30 GPa和1200 K下,原子质量相对碳元素较重的钠原子表现出异常的扩散行为,其存在超离子态行为,而原子质量较轻的碳原子由于三维间隙电子态的形成过程和多中心成键效应而始终保持在晶格平衡位置。并且我们对C2/m-Na₆C的电子性质研究表明,在常压下,C2/m-Na₆C的最低功函数为2.82 eV,表明其潜在的催化性能可应用于催化材料。我们的研究不仅深化了对中等压强条件下3D间隙电子态对超导态和超离子态行为影响的理解,还为该领域未来的理论与实验研究提供了重要启示。



关键词: 电子化合物、超导电性、超离子态

压力诱导 $FeCo_2Se_4$ 中新型S = 0 自旋态的理论研究

<u>王弈铭</u>、曲佳、杨文革

北京高压科学研究中心

Email: yiming.wang@hpstar.ac.cn, jia.qu@hpstar.ac.cn, yangwg@hpstar.ac.cn

摘要:

我们基于第一性原理计算,在 Cr₃S4 型后尖晶石结构的 FeCo₂Se₄体系中,理论设计出一种环境压力下的半金属反铁磁体,并系统研究了其在高压条件下的磁构型与电子结构演变。具体而言,Fe²⁺离子与Co³⁺离子均分布于八面体配位位点,分别处于高自旋(HS, $t_{2g}^4e_g^2$)态和中等自旋(IS, $t_{2g}^5e_g^1$)态,从而实现了两者磁矩的相互补偿。当外加压力达到 7.2 GPa 时,Co³⁺由 IS 态发生向低自旋(LS)态的转变,体系被迫转入铁磁(FM)态(每化学式磁矩 4 μ_B),且 Co³⁺离子电子完全成对,导致半金属性消失、体系呈现金属性。该 FM 态可持续至 27.7 GPa,此后由于 Fe²⁺离子由 HS 态向 IS 态的自旋转变,体系进入另一种 FM 态(每化学式磁矩 2 μ_B)。最终,当压力增至 68.8 GPa 时,Fe²⁺完全转变为 LS 态且无未成对电子,体系转为无磁(NM)态。每一次自旋态转变均伴随着显著的体积塌缩和电子结构重构,且所得到的压力下新磁性构型在热力学、晶格动力学及力学方面均表现稳定。



图 1 (a) FeCo₂Se₄不同磁性构型的相对焓值与压力的关系。图例中 NM、FM、FIM 和 AFM 分别表示无磁态、铁磁态、亚铁磁态和反铁磁态。(b) FeCo₂Se₄的晶胞体积随压力的变化。实线为三阶 Birch-Murnaghan 状态方程的拟合结果。

关键词: 高压; 后尖晶石; 自旋转变; 体积塌缩 参考文献:

1. I. Kim, H. Lee, H. Nahm, and M. Choi, Spin Crossover of the octahedral Co ion in Co₃S₄: Emergence of hidden magnetism, *Phys. Rev. Res.*, **4**, 033171 (2022).

2. G. J. Synder, T. Caillat, and J.-P. Fleurial, Thermoelectric Properties of Cr₃S₄-Type Selenides, *MRS Proceedings*, **545**, 333 (1998).

混合阴离子 CuBiSeCl2中应变调制的四声子和相干热输运: 超低晶 格热导率和增强的热电性能

曾祥榆, 隋来志*, 袁开军

中国科学院大连化学物理研究所,大连,116023 Email: lzsui@dicp.ac.cn

摘要:

近年来,应变工程为调节声子和电子输运以提高热电性能提供了有前景的策略。在这里,我们对 机械应变下混合阴离子半导体 CuBiSeCl₂的晶格动力学、电子输运和热导率进行了全面的第一性原理 研究。明确考虑了三声子和四声子散射对相干热输运的影响。我们的结果揭示了强烈的内在非谐性和 孤对电子活性,导致晶格热导率极低,300K 时约为 0.33 的 W/mK。在拉伸应变下,相干声子输运增 强,反映了扩散和波状热传导之间的竞争。对于 n 型掺杂,拉伸应变会改变电子-声子耦合,并改善沿 b 轴的电输运性质,在 800 K 下,产生 ZT≈0.8 的峰值品质因数。这些发现突出了应变工程对声子和载 流子输运的协同影响,并为相干声子效应和四声子散射在混合阴离子热电材料中的作用提供了新的见 解。



图 1 在 0%和±3%应变下的 ZT 值随温度的变化(载流子浓度为 1×10²⁰cm⁻³),用两种方法下晶格热导率 $\kappa_L^{3,4ph} = \kappa_P^{3,4ph} + \kappa_C^{3,4ph} \pi \kappa_L^{3ph} = \kappa_P^{3ph} + \kappa_C^{3ph}$ 计算 ZT。(b) 三种应变下 ZT 值为掺杂浓度的函数,比较 300 K 和 700 K 的热电优值,总晶体导热系数选为 $\kappa_L^{3,4ph}$ 。

关键词: 相干热导率 混合阴离子化合物 热电材料 四声子散射 应变工程 参考文献

- A. Das, K. Pal, P. Acharyya, S. Das, K. Maji, and K. Biswas, Strong Antibonding I (p)–Cu (d) States Lead to Intrinsically Low Thermal Conductivity in CuBiI₄, J. Am. Chem. Soc. **145**, 1349 (2023)
- 2. C. J. Hawkins et al., Synthesis, Structure, and Properties of CuBiSeCl₂: A Chalcohalide Material with Low Thermal Conductivity, Chem. Mater. 36, 4530 (2024).
- L. Ji, A. Huang, Y. Huo, Y. Ding, S. Zeng, Y. Wu, and L. Zhou, Influence of four-phonon scattering and wavelike phonon tunneling effects on the thermal transport properties of TIBiSe₂, Phys. Rev. B 109, 214307 (2024).

高温高压下锡的多相物态方程与弹性模量的第一性原理计算

陈凯乐1, 王越超1, 徐远骥2*, 刘瑜1*

 中国工程物理研究院北京应用物理与计算数学研究所,北京 100088
2. 北京科技大学数理学院,北京 100083 Email: chenkaile22@gscaep.ac.cn

摘要:

金属锡是高压物理研究的热点问题,是国防科技关注的重要材料。锡具有丰富的物相,无论是基础 研究,还是工业应用,锡的多相物态方程和相界都至关重要。采用密度泛函理论结合平均场势方法,系 统研究了锡的高温高压多相物态方程、相界、弹性模量、声速和 Hugoniot 线等,不仅获得了高温高压 下锡的多相物态方程,而且计算得到的β-γ相界、β-Sn 的常压声速与实验结果吻合较好,说明平均场 势方法(MFP)可以对锡的有限温下压缩线、弹性模量和声速进行合理且高效的预测。此外,进一步研 究了不同密度泛函对锡的高温高压物态方程的影响,研究结果表明:对锡而言,在平衡态物性上 PBEsol 表现最好,在零温相界与声速上 LDA 表现最好,通过 LDA 和 PBEsol 泛函得到的主 Hugoniot 线及常压 弹性模量与实验结果的一致性较好。

关键词:多相物态方程;弹性模量;第一性原理计算;平均场势 参考文献

1. 陈凯乐,王越超,徐远骥,刘瑜,咸家伟,王丽芳,简单,刘海风,宋海峰.锡的多相物态方程第一性原理计算研究.[J]. 高压物 理学报.已录用. doi:10.11858/gywlxb.20251054

机器学习势在超导体 LaBeH。的量子效应与非谐效应研究中的应用

董桂言¹, 霍子豪¹, 段德芳^{1,*}, 崔田^{1,2*}

1吉林大学物理学院,2宁波大学理学院

Email: duandf@jlu.edu.cn (D. D)

近年来,理论指导实验成功合成了新型三元氢化物 LaBeH₈,其在 80 GPa 压力下具有最高超导临界 温度 110 K¹⁻²,这为在百万大气压以下实现三元氢化物的高温超导提供了希望。众所周知,氢化物由于 含有丰富的氢元素,它的结构和超导电性会显著受到量子效应与非谐效应的影响³⁻⁴,因此有必要对 LaBeH₈ 引入非谐修正。本研究提出了一种结合机器学习势与随机自洽谐波近似(SSCHA)的高效计算方 案,可以加速不同压力下非谐性与超导性计算。我们发现,由于量子离子效应与非谐声子效应对超导性 的影响相互抵消,非谐效应对 LaBeH₈ 的超导性影响较小。然而,非谐修正后的 *T*_c 与实验测量值的吻合 度显著优于谐波近似结果。本研究揭示了氢化物非谐修正的重要性,并证明机器学习可成为未来氢化物 非谐校正的有力工具。



图 1 SSCHA 与机器学习 MTP 的整合。(a) SSCHA-MTP 协同计算流程;(b)-(d) MTP 在 20 组 DFT+SSCHA

测试构型中的能量、力分量、应力张量预测结果与 DFT 基准值对比。

关键词: 高压, 超导电性, 非谐效应, 机器学习, 第一性原理计算 参考文献

- 1. Z.Zhang et al, Physical Review Letters, 128 (4) (2022) 047001
- 2. Y.Song et al, Physical Review Letters, 130 (26) (2023) 266001
- 3. Errea, I. et al, Nature, 532 (7597) (2016) 81
- 4. Errea, I. et al, Nature, 578 (7793) (2020) 66

钨初级辐照损伤的神经网络分子动力学模拟

杜泽依、陈博、刘洪洋; 戴佳钰*

国防科技大学理学院 Email::jydai@nudt.edu.cn

摘要:

近年来,钨作为优秀的聚变堆装置材料,需要面对聚变堆环境下十分严苛的高辐照环境。分子动力 学模拟(MD)可以在原子尺度下揭示材料的辐照损伤机制,这对理解钨在恶劣复杂环境中的宏观性能 退化至关重要,而现有的原子间势具有各种局限,极大地影响了MD模拟结果的准确与否。本文采用 一种结合三体嵌入描述符与深度势(DP)框架训练的深度学习势函数(DP-HYB-ZBL),用以钨的初级 辐照损失碰撞模拟。分别研究了初级碰撞原子(PKA)能量、温度、晶界等因素对于缺陷演化的影响, 发现 DP-HYB-ZBL 在位错环预测方面具有更良好的表现,同时分析了辐照诱导位错环的存在对于材料 力学性能的影响。

关键词: 钨; 辐照; 机器学习; 位错环

高压下富锂化合物中的超导电性和双超离子性

<u>郭淑敏</u>¹、张子涵¹、霍子豪¹、马浩¹、蒋其雯¹、崔田^{2,1,*}、Andreas Hermann^{3,*}、

段德芳 1,*

¹吉林大学物理学院;²宁波大学高压物理科学研究院;³英国爱丁堡大学物理与天文学院 Email: duandf@jlu.edu.cn; a.hermann@ed.ac.uk; cuitian@nbu.edu.cn

轻元素化合物,尤其是富氢化合物¹,作为超导体、超离子体和电子化合物材料²³的沃土受到广泛 关注,显示出巨大的实际应用潜力。然而,氢化物的适用性总是受到H₂分子键合作用的限制,但这并 不影响基于其他轻元素所形成的化合物。因此,我们探索了受益于锂的多种键合机制的致密富锂化合物。 具体来说,三元化合物*Fm-3m-LisPtH*具有强稳定性和显著的常规超导性(350 GPa下*T*。达到111 K)。 我们证明了LisPtH的集体电子和原子态源于化学相互作用,包括H原子与局域电子之间的化学键合, 以及Li和Pt之间的*p-d*轨道耦合。这一理论框架可以扩展到更广泛的金属间化合物。此外,我们报告 了LisPtH的双重超离子性,其中锂的扩散温度低于氢。随着温度进一步升高,氢的扩散导致体系从自 由金属到电子化合物行为的转变。我们的研究从锂与金属*p-d*耦合的角度解释了富锂化合物中超导性和 超离子性的根本原因,从而为合理设计一类新型高温超导体提供了理论依据。

关键词: 高压; 超导电性; 超离子态; 电子化合物; p-d 轨道耦合

参考文献

1. Z. Zhang, T. Cui, M. J. Hutcheon, A. M. Shipley, H. Song, M. Du, V. Z. Kresin, D. Duan, C. J. Pickard, and Y. Yao, Design principles for high-temperature superconductors with a hydrogen-based alloy backbone at moderate pressure, Phys. Rev. Lett., **128**, 047001 (2022).

 M.-S. Miao and R. Hoffmann, High-pressure electrides: the chemical nature of interstitial quasiatoms, J. Am. Chem. Soc., 137, 3631 (2015).

3. X. Wang, Y. Wang, J. Wang, S. Pan, Q. Lu, H.-T. Wang, D. Xing, and J. Sun, Pressure stabilized lithium-aluminum compounds with both superconducting and superionic behaviors, Phys. Rev. Lett., **129**, 246403 (2022).

对称性原理加速的晶体结构预测算法

韩瑜、孙建

南京大学物理学院 Email: yuhan@nju.edu.cn (Times New Roman 五号字)

摘要:

近年来,结合第一性原理计算的晶体结构预测算法,已成为探索新材料的有力工具。该方法只需要 极少的先验信息,就能确定与晶体体系最小自由能相对应的原子排列构型。除了有助于解析实验观测到 的晶体结构外,晶体结构预测算法还在预测具有独特性质的新型功能材料(例如高压超导材料)等方面 发挥了重要作用。

尽管晶体结构预测算法取得了显著成效,但它们在大型复杂体系的应用仍然受限。为了应对这一挑战,我们基于 MAGUS (机器学习和图论辅助的结构搜索方法)框架[1-2],提出了一种受对称性原理 启发的进化结构生成器[3]。该生成器利用群论和图论提取全局和局部结构特征。通过集成动态空间群 挖掘器和片段重组器,并结合保持对称性的突变,我们的方法可以生成更高质量的初始结构,从而降低 了晶体结构预测算法的计算成本。

基准测试表明,新算法的性能提升高达四倍。该方法已在复杂的红磷体系中得到成功验证。此外, 我们将该方法应用于硅(111)-(7×7)表面体系,在 18 meV/Å² 的能量范围内识别出 42 个亚稳态结构,彰 显了其在复杂搜索空间中的有效性。这些发现凸显了该方法在发现新型高压材料方面的潜力。



图 1 对称性原理启发的结构搜索方法,可以极大提升结构搜索效率。

关键词: 晶体结构预测、第一性原理计算、功能材料设计参考文献

- Xia, K. et al. A novel superhard tungsten nitride predicted by machine-learning accelerated crystal structure search. Sci. Bull. 63, 817–824 (2018).
- Wang, J. et al. MAGUS: machine learning and graph theory assisted universal structure searcher. Natl. Sci. Rev. 10, nwad128 (2023).
- 3. Han, Y. et al. Efficient crystal structure prediction based on the symmetry principle. Nature Computational Science 5, 255 (2025).

三元 Cs-In-H 化合物在低压下的高温超导电性研究

黄泓瑜1, 王敏1, 严小燕1, 宋吴1, 段德芳2, 杜明阳1,*崔田1,2,*,

1 宁波大学高压物理科学研究院, 宁波 315211

² 吉林大学物理学院, 计算方法与软件国际中心, 长春 130012 Email: 2311690094@nbu.edu.cn

摘要:

氢化物超导体是实现高温超导的潜在候选材料,但其稳定所需的高压条件限制了实际应用。本研究系统研究了 50 GPa 下的 Cs-In-H 三元氢化物,发现了四种热力学稳定相及一种 亚稳高对称结构 Pm-3m-Cs₃InH₇。理论预测表明,该亚稳相在 41 GPa 下表现出 81 K 的高温 超导特性,这源于其独特的 In-H₂ 合金骨架与单 H 原子协同调控机制:费米面附近的 In-H 电子态及声子软化效应共同促进了高温超导特性。本研究揭示了多元氢化物中 In-H₂ 合金骨 架与体心氢的协同超导机制,为低压高效氢化物超导材料的设计提供了创新思路,其理论预 测结果为高压实验合成指明了方向。



图 1 50 GPa下 Cs-In-H 体系的三元热力学稳定凸包。红色实心圆代表稳定结构,深蓝色代表 不稳定结构,浅蓝色代表亚稳结构 Pm-3m-Cs₃InH₇。位于三角形边角的元素(Cs、In、H) 及二元化合物的结构数据来于已有研究。

关键词:氢化物;高压;超导电性;第一性原理计算

氢化和氟化过渡金属硼化物 Mo₂B 超导电性的理论预测

季润贤、段德芳1,*

吉林大学物理学院 Email: 2367886905@qq.com

摘要:

近年来,二维层状金属硼化物的超导特性成为研究热点。这类材料具有独特的物理性质,因其轻质特点在超导领域展现出潜在价值,但由于硼化物的特殊性,硼化物的超导电性问题一直没有得到很好的解决。在此,基于第一性原理计算,我们在理论上研究了2D氢化和氟化的Mo₂B:Mo₂BX₂(X=H,F),研究了它们的晶格结构、电子结构、热稳定性、电声子耦合(EPC)、超导性能结果表明,通过氢化和氟化Mo₂B,重新排列相关的表面电子和低频振动杂化,可以强烈地增强费米能级处的电子态密度和电子-声子耦合,从而将Mo₂B的转变温度显著提高,尤其氟原子的引入将T相Mo₂B超导转变温度显著提高到28K。通过进一步施加双轴拉伸应变,可以改变材料的晶格常数和电子能带结构,有效地调控了电子-声子耦合强度,实现超导转变温度的进一步提高,在4%双轴压缩应变下,H相的Mo₂BF₂的超导转变温度为30.67K。这将填补在环境压力下研究可能的传统高温超导体的空白,未来研究中可望在实验合成、性能表征以及器件应用等方面取得突破性进展。

关键词: 第一性原理; 超导电性; MBenes; 氢化过渡金属硼化物

参考文献

1. J. Bekaert, M. Petrov, A. Aperis, P. M. Oppeneer, M. V. Milosevic, Hydrogen-Induced High-Temperature Superconductivity in Two-Dimensional Materials: The Example of Hydrogenated Monolayer MgB. Phys Rev Lett 123, (2019).

2. L.Yang et al., Theoretical Prediction of Superconductivity in Boron Kagome Monolayer: MB₃(= Be, Ca, Sr) and the Hydrogenated CaB₃. Chinese Phys Lett 40, (2023).

强关联材料模拟的双屏蔽库仑修正方法

<u>刘倍雷</u>¹、王越超^{1*}、刘瑜^{1*}、高兴誉¹、刘海风¹、宋海峰^{1*} 1 计算物理全国重点实验室,北京应用物理与计算数学研究所,北京,100094 Email: yuechao wang@126.com, liu yu@iapcm.ac.cn, song haifeng@iapcm.ac.cn

强关联材料的高压物性研究具有重要的科学与应用价值。以DFT+U、DFT+DMFT为代表的DFT+X 方法通过引入修正模型,有效弥补了传统密度泛函理论对电子关联效应描述的不足,已成为强关联体系 物性模拟领域的主流方法。不过,其中关键修正模型的现有自洽构建方法仍存在计算效率或屏蔽效应刻 画方面的不足,难以满足宽压域计算场景的需求。

为此,我们设计并实现了双屏蔽库仑修正(DSCC)方法。它采用介电屏蔽模型模拟局域 d/f 电子间在位库仑相互作用,以保持与传统 DFT 相近的计算代价;屏蔽模型同时涵盖了金属与绝缘体的渐进行为。在 U/J 值模拟方面,DSCC 可以很好地反映局域化学环境差异,计算精度不低于标杆性的 cRPA 方法;在电子结构计算方面,DSCC 能够对能隙及磁有序性给出与高精度杂化泛函相当的描述,但计算 成本均低 1-2 个量级。在宽压域性质模拟方面,采用了压力依赖的电子关联效应修正计算获得的含 f 电子金属宽压域晶格结构行为与固定参数的关联效应修正方法相比,与实验数据更为吻合,对于含 d 电子过渡金属氧化物的电子结构随压力演化也获得了很好描述。

我们的工作不仅显著地提升了 DFT+X 一类方法的预测能力,并为宽压域范围内在位库仑作用的快速评估提供了可靠技术途径。



图 1 应用于强关联材料宽压域模拟的双屏蔽库仑修正方法示意图

关键词:强关联材料;介电屏蔽方法;宽压域场景参考文献

[1] B.-L. Liu, Y.-C. Wang, Y. Liu et al., J. Chem. Phys., 2023, 158:084108.

[2] B.-L. Liu, Y.-C. Wang, Y. Liu, H.-F. Liu, H.-F. Song, J. Phys. Chem. Lett., 2023, 14:8930.

[3] B.-L. Liu, Y.-C. Wang, X. Gao, H.-F. Liu, H.-F. Song, Phys. Rev. B, 2025, 111:115139.

10 GPa 下离子化的σ键诱导的超导电性

刘鹏叶、刘艳辉、刘召*、崔田*

宁波大学高压物理科学研究院, 宁波 315211 Email: liuzhao@nbu.edu.cn

摘要:

在低压条件下发现高温超导体并阐明控制超导性的潜在关键因素是凝聚态物理领域的核心科学问 题之一^[1-3]。本文中,我们提出了一种通过将 NH₃单元引入填充 *f* 壳层的镥(Lu)晶格中来实现 σ键金 属化的策略,并获得了 Lu^{δ+}(NH₃)4^{σ-}氢化物,用于探索其潜在的高温超导性质。基于密度泛函理论计算, 我们提出的 *I*-43*m*-Lu^{δ+}(NH₃)4^{σ-}相在 10 GPa 下展现出 33.44 K 的超导转变温度。进一步的分析表明, 超导转变温度的产生归因于强烈的电子-声子耦合,其主要源于 H-N-H 弯曲和扭曲振动驱动的大的电声 耦合矩阵元以及费米面嵌套诱导的光学声子软化使声子耦合带上的巡游电子被散射形成库珀对。重要的 是,声子耦合带的出现主要依赖于 NH₃中 sp³杂化σ键的电离,从而表现出金属性。由于加压增强了σ 带的电离和原子间耦合效应,超导转变温度进一步提高到 130 K。本研究为在较低压力条件下实现声子 介导的高温超导性提供了新的视角,并强调了通过金属化σ键的战略工程在填充的*f*-壳层的金属氢化物 中实现高超导转变温度的潜力。



图 1 (a) 在 10 GPa 压力下, NH₃分子被掺入 *I*-43*m*-Lu(NH₃)₄的惯用晶胞中; (b) 在 10 GPa 压力下 Lu-N-H 体系的三角形成焓凸包图; (c) *I*-43*m*-Lu(NH₃)₄的三维和二维电子局域函数。 关键词:超导性,低压,金属化σ键,填充*f*壳层金属氢化物

高压下层状 AsN 体光伏效应的理论研究

刘媛媛、李宗伦*、姚震*

吉林大学高压与超硬材料国家重点实验室 Email: lizi20@mails.jlu.edu.cn; yaozhen@jlu.edu.cn

摘要:

非中心对称晶体通常具备通过其内在的体光伏效应自发产生光电流的潜力,因此在光电子学的先进 应用中展现出广阔的前景。我们采用第一性原理计算,报道了一种在高压条件下稳定存在的新型层状砷 氮化物 AsN,其晶体结构属于 Cmc21空间群,突出了其具有优异的体光伏响应。在 20 GPa 至 30 GPa 的压力范围内,层状 AsN 的体光伏非线性位移电流峰值由 11.4 mA/V² 增加至 13.3 mA/V²,这一增强主 要归因于氮 2s 轨道与砷 4p 轨道之间杂化程度的轻微提升。同时,层状 AsN 在该压力范围内保持稳定 的间接带隙(1.96–2.05 eV)。其位移电流与带隙对压力变化表现出极低的敏感性,表明层状 AsN 在极 端环境下具有良好的光电性能和器件应用潜力,同时也显著加深了我们对氮化物体系功能特性及光电响 应机制的理解。



图 1 Cmc2₁ AsN 在 20 GPa 的位移电流谱。

关键词: 体光伏效应 高压 非中心对称 层状 AsN 位移电流 参考文献

1. Yuanyuan Liu, Zonglun Li*, Bo Jin, Shuang Liu, Shuangchen Lu* and Zhen Yao*, Promising bulk photovoltaic effect in noncentrosymmetric layered AsN under high pressure. *Cell Reports Physical Science*, 2025, 6, 102365.

高压下 CeH10 的氢空位结构及性质研究

<u>马浩</u>,张子涵,霍子豪,蒋其雯,陈玲,马天成,安德成,段德芳*,崔田[#] ¹吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室;²宁波大学物理科学及技术学院高压 物理科学研究院

Email: <u>*duandf@jlu.edu.cn</u>, <u>#cuitian@nbu.edu.cn</u>

摘要:

近期研究发现,具有笼形结构的金属氢化物在高压下具有潜在室温超导电性^[1-4]。然而,高压下氢 元素化学计量比的精确测定在实验中存在挑战,且氢空位对超导笼形氢化物性能的影响机制尚未明确。 本研究系统探究了含氢空位的超导氢化物 CeH₁₀的超导电性与热力学性质。结果表明,在面心立方晶格 中发现的含氢空位非化学计量的笼形氢化物 CeH_{9.75},其热力学稳定压力显著低于完美的 CeH₁₀。据报道, 氢空位通常诱导笼形氢化物产生超离子态^[5],但 CeH_{9.75}的超离子态转变温度反而高于完整 CeH₁₀,这揭 示氢空位可提升氢扩散势垒从而在较低的压力下稳定笼形结构。此外,CeH_{9.75}的超导转变温度与晶胞 体积数据与实验相图高度吻合,表明由氢空位驱动的笼形氢化物非化学计量现象可能普遍存在于氢化物 高压相图中。

关键词:氢空位、非化学计量、氢化物、超导

参考文献

- [1]Liu H., Naumov, II, Hoffmann R., et al. Potential high-T(c) superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure[J]. Proc Natl Acad Sci USA, 2017, 114(27): 6990-5.
- [2]Peng F., Sun Y., Pickard C. J., et al. Hydrogen Clathrate Structures in Rare Earth Hydrides at High Pressures: Possible Route to Room-Temperature Superconductivity [J]. Phys Rev Lett, 2017, 119(10): 107001.
- [3]Wang H., Tse J. S., Tanaka K., et al. Superconductive sodalite-like clathrate calcium hydride at high pressures [J]. Proc Natl Acad Sci USA, 2012, 109(17): 6463-6.
- [4]Li Y., Hao J., Liu H., et al. Pressure-stabilized superconductive yttrium hydrides [J]. Sci Rep, 2015, 5(1).
- [5]Wang H., Salzbrenner P. T., Errea I., et al. Quantum structural fluxion in superconducting lanthanum polyhydride [J]. Nat Commun, 2023, 14(1).

高通量筛选具备室温超导电性和热力学稳定性的笼型氢化物

马天成¹,张子涵¹,安德成¹,武淑婷¹,崔田^{2,1},段德芳^{1,*}, ¹吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室;²宁波大学物理科学及技术 学院高压物理科学研究院

*Email: duandf@jlu.edu.cn

摘要:室温超导电性的实现是自超导现象发现以来科研工作者的百年梦想,它的应用将会给 社会生产、生活方式等带来深刻的技术变革。近年来,由第一性原理计算引导,在实验上成 功合成了一系列以LaH₁₀[1]和CaH₆[2]为代表的笼型氢化物,并测量到了最高250K的近 室温超导转变温度。因此笼型氢化物被认为是实现室温超导这一终极目标的重要途径之一。 最近报道的高温超导笼型氢化物 Na₃LiH₂₃[3],Li₂NaH₁₇[3]和LaSc₂H₂₄[4]等,他们大多采用 多种笼型单元拼接的复杂笼型框架,呈现出结构复杂、元胞中原子数量众多的特点。如何在 广阔的三元构型空间中,搜索和构建这类笼型结构,并筛选出兼备高温超导电性和热力学稳 定性的笼型氢化物,是亟待解决的重要问题。此次,我们建立了估算笼型氢化物超导转变温 度的经验模型,即"AE 模型"[5]。并基于笼型氢化物中氢原子按四面体方向成键的特点, 参考水合物和第14族元素化合物,在具有更广阔构型空间的三元氢化物中设计了一系列复 杂笼型氢化物。利用系统全面的高通量 DFT 计算和自建高压晶体结构数据库,结合 AE 模 型,成功筛选出了具有高超导转变温度潜力,兼备热力学和动力学稳定性的笼型氢化物,如 Na₃ScH₂₃(*T_c* = 289 K),CaLi₂H₁₇(*T_c* = 326 K),Na₁₀Li₅H₈₆(*T_c* = 341 K)和 SrLi₂H₁₇(*T_c* = 309 K) [6]等。我们进一步定义了匹配因子,该因子可作为氢化物热力学稳定性的良好描述符,为 筛选超越三元的,更大、更复杂的笼型氢化物开辟了一条有效途径。

关键词: 室温超导电性; 第一性原理计算; 氢化物; 高通量计算

参考文献:

[1] A. P. Drozdov et al., Nature 569, 528 (2019).

[2] L. Ma et al., Phys. Rev. Lett. 128, 167001 (2022).

[3] D. An, L. J. Conway, D. Duan, Z. Zhang, Q. Jiang, H. Song, Z. Huo, C. J. Pickard, and T. Cui, Adv. Funct. Mater. 24, 18692 (2024).

[4] X.-L. He, W. Zhao, Y. Xie, A. Hermann, R. J. Hemley, H. Liu, and Y. Ma, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **121**, e2401840121 (2024).

[5] T. Ma, Z. Zhang, M. Du, Z. Huo, W. Chen, F. Tian, D. Duan, and T. Cui, Mater. Today Phys. 38, 101233 (2023).

[6] T. Ma, D. Duan et al., Preprint at https://doi.org/10.48550/arXiv.2412.13431 (2025).

基于 GPUMD 的分子动力学模拟方法开发

潘书宁,施九洋,梁智新,王俊杰,王勇,孙建

南京大学物理学院 Email: dz20220023@smail.edu.cn

摘要:

GPUMD 是一款由渤海大学樊哲勇教授主导开发的开源分子动力学模拟软件,采用 CUDA 语言编写,其模拟速度较传统分子动力学软件提升了 1-2 个数量级。该软件集成了机器学习力场 NEP,能够实现接近量子力学精度的模拟。基于 GPUMD,我们实现了多种分子动力学算法,包括热力学积分算法(适用于平衡态与非平衡态)、MTTK 热浴(支持 NVT、NPT、NPH 系综)、非平衡态冲击压缩模拟、多尺度冲击压缩模拟(MSST)、Hugoniot 热浴(Hugoniostat)以及主动学习算法等。这些方法的实现不仅推动了高压科学领域的研究进展,还显著拓展了 GPUMD 的应用范围。



图 1 GPUMD 研究斯石英的各向异性冲击响应。

关键词: 高压, 相变, 晶体结构预测, 分子动力学, 机器学习势函数 参考文献

- <u>Shuning Pan</u>, Tianheng Huang, Allona Vazan, Zhixin Liang, Cong Liu, Junjie Wang, Chris J. Pickard, Hui-Tian Wang, Dingyu Xing, Jian Sun, Magnesium oxide-water compounds at megabar pressure and implications on planetary interiors, Nat. Commun. 14, 1165 (2023)
- <u>Shuning Pan</u>, Jiuyang Shi, Zhixin Liang, Cong Liu, Junjie Wang, Yong Wang, Hui-Tian Wang, Dingyu Xing, Jian Sun, Shock compression pathways to pyrite silica from machine learning simulations, Phys. Rev. B 110, 224101 (2024)
- 3. Xiaokang Feng, Shuning Pan et al., Nanosecond structural evolution in shocked coesite, Sci. Adv. (Accepted)

利用限域模板在环境条件下截获层状 LP-N 和 HLP-N

王冬雪1、姚震1*、刘爽1*、刘冰冰1*

1吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室

*Email: yaozhen@jlu.edu.cn, liu_shuang@jlu.edu.cn, liubb@jlu.edu.cn

摘要:

聚合氮是研究的热点,由于其在能量存储、推进剂和炸药等方面的潜在应用。然而,聚合氮动力学 稳定性较低使其难以在环境条件下稳定。¹⁴值得兴奋的是,具有中空结构的纳米材料为稳定客体分子 提供了理想的空间。

我们利用二维限域模板(h-BN 和石墨烯)系统地研究了多原子厚层聚合氮(LP-N, HLP-N and BP-N) 在环境条件下的截获。结果表明 LP-N 和 HLP-N 可以截获至环境条件。进一步的研究表明,限域 LP-N 和 HLP-N 环境条件稳定的机制是电荷转移和范德华限域效应的协同作用。此外,聚合氮自身的稳定性 也是他们成功截获的一个重要因素。我们揭示了层间距对 LP-N 稳定性的影响规律,层间距过小会产生 较大的排斥力作用;而过大的层间距无法提供足够的限域效应,两者都可能导致他们在环境条件下分解。 最重要的是,LP-N@graphene (70.59%, 8.15 kJ/g),LP-N@h-BN (70.59%, 7.96 kJ/g),HLP-N@graphene (68.97%, 9.31 kJ/g) and HLP-N@h-BN (69.57%, 8.05 kJ/g)四个体系均具有良好的含氮量和能量密度。



图 1 LP-N@h-BN (a), LP-N@graphene (b), HLP-N@h-BN (c), HLP-N@graphene (d),

BP-N@h-BN (e), and BP-N@graphene (f)原胞的主视图和俯视图。

关键词:限域效应,高能密度材料 参考文献

- 1. Eremets M I, Gavriliuk A G, Dzivenko D A, and Boehler R 2004 Nat. Mater. 3 558
- 2. Tomasino D, Smith J, and Yoo C S 2014 Phys. Rev. Lett. 113 205502
- 3. Laniel D, Geneste G, Mezouar M, and Loubeyre P 2019 Phys. Rev. Lett. 122 066001
- 4. Ji C, Adeleke A A, Yang L X, Wan B, Gou H Y, Yao Y S, Li B, Meng Y, Smith J S, Prakapenka V B, Liu W J, Mao W L, and Mao H K 2020 Sci. Adv. 6 eaba9206

E(n)等变的高阶笛卡尔张量消息传递网络

王俊杰、孙建

南京大学物理学院 Email: wangjunjie@nju.edu.cn

摘要:

近年来,消息传递网络因其卓越的精度而受到广泛关注,基于笛卡尔坐标的消息传递网络也因此涌现。然而,在这些模型中,节点所包含的信息通常仅限于标量和向量。在本研究中,我们提出了一种高阶张量消息传递原子间势[1](High-order Tensor message Passing interatomic Potential, HotPP),这是一种具有 E(n)等变性的消息传递神经网络,它将节点嵌入和消息扩展到任意阶的张量。通过执行一些基本的等变操作,高阶张量之间可以非常简单地耦合,从而使模型能够直接预测如偶极矩和极化率等高阶张量,而无需进行任何修改。在多个数据集上的测试表明,HotPP 不仅在预测目标性质方面具有很高的精度,还能够成功完成声子谱、红外谱和拉曼谱的计算等任务,展现出其作为未来研究工具的潜力。



图 1 HotPP 网络架构

关键词:机器学习力场;消息传递网络;E(3)等变网络 参考文献

1. Wang, J. et al. E(n)-Equivariant cartesian tensor message passing interatomic potential. Nat Commun 15, 7607 (2024).

中压下四元双钙钛矿氢化物超导性的理论研究

王敏1、邓超1、黄泓瑜1、杜明阳1、段德芳2、宋昊1*、 崔田1,2+

1 宁波大学,物理科学与技术学院,高压物理科学研究院

² 吉林大学,物理学院,材料模拟方法与软件教育部实验室和超硬材料国家重点实验室 Email: songhao@nbu.edu.cn, cuitian@nbu.edu.cn

摘要:

最近,钙钛矿氢化物因其在中等压力下优异的超导性而受到广泛关注。基于钙钛矿结构 *Pm***3***m*-KInH₃,设计了一系列四元双钙钛矿氢化物 *A*₂In*Z*H₆ (A=Li, Na, K, Rb, Cs; Z=Cu, Ag, Au, Zn, Cd, Hg, Ga, Tl, Ge, Sn, Pb, As, Sb, Bi)。高通量筛选显示,其中 27 种化合物在 50 GPa 以下具有动态稳定性。在中等 压力下动力学稳定的双钙钛矿氢化物 *A*₂In*Z*H₆ 都是超导体。四种氢化物表现出高温超导性,包括 K₂InCuH₆ (92 K)、K₂InAuH₆ (108 K)、Cs₂InGeH₆ (82 K)和 Cs₂InAuH₆ (104 K)。而 K₂InAgH₆ 的超导 *T_c* 为 75 K,接近液氮温度。K₂InCuH₆在 Γ 点的平带受 H-*s* 和 Cu-e_{*Ig*} 轨道杂化控制。进一步的分析表明, 电子和以氢主导的光学声子之间存在很强的耦合。这种强电子-声子耦合 (EPC) 在 K₂InCuH₆ 的高温超 导中起关键作用。随着压力的增加,K₂InCuH₆ 的 λ 迅速降低。我们的结果增强了在中等压力下寻找 高温超导钙钛矿氢化物的信心,并鼓励进一步勘探四元超导氢化物。



图 1 (a) *Pm***3***m* -AXH₃ (b) 2×2×2 超胞 A₈X₈H₂₄ (c) *Fm***3***m* -A₂XZH₆,粉红色、橙色、浅蓝色和淡粉色 球分别代表 A、X、Z 和 H 原子

关键词:双钙钛矿氢化物,中压,超导电性,第一性原理计算

Pressure induced enhancement of anharmonicity and optimization of thermoelectric properties in n-type SnS

Ning Wang¹, Jincheng Yue¹, Siqi Guo¹, Hui Zhang¹, Shuli Li¹,

Manai Cui^{2,‡,} Yanhui Liu^{1,†}, Tian Cui^{1,3,§}

1 School of Physical Science and Technology, Institute of High Pressure Physics, Ningbo University, Ningbo 315211, China

2 Department of Physics, College of Science, Yanbian University, Yanji 133002, China

State Key Laboratory of Superhard Materials, College of Physics, Jilin University,
Changchun 130012, China
Email: wn15274728705zx@163.com

Pressure serves as a powerful approach to regulating the thermal conductivity of materials. By applying pressure, one can alter the lattice symmetry, atomic spacing, and phonon scattering mechanisms, thereby exerting a profound influence on thermal transport properties. SnS, sharing the same crystal structure as SnSe, has often been overlooked due to its higher lattice thermal conductivity. While extensive efforts have been dedicated to enhancing the power factor of SnS through doping, its thermal transport properties remain underexplored, limiting its potential as a thermoelectric material. In this study, we investigated the impact of pressure modulation on the thermoelectric performance of SnS. Remarkably, the application of negative pressure significantly enhanced its thermal transport characteristics, leading to a reduction in the lattice thermal conductivity(κ_L) along the *a* axis to 0.23 W/(m·K) at 800 K, on par with that of SnSe. Despite the negligible improvement in carrier mobility under negative pressure, the electronic transport properties were preserved within an acceptable range. Most notably, a maximum ZT value of 2.7 was achieved along the axis at 800 K, marking a substantial advancement in the thermoelectric performance of n-type SnS.

高压下 A15 型三元超导氢化物的理论设计

魏旭东、郝晓宽、高国英*、田永君

高压科学中心, 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室, 燕山大学 Email: gaoguoying@ysu.edu.cn

摘要:

自从氢基超导体被认为是室温超导体的候选材料以来,二元氢化物在理论上已被详尽的探索,许多高温超导体已经被发现。近年来,三元氢化物已经成为研究人员的重点关注对象。但三元氢化物的组分和结构可能性很多,选择一条恰当的路径才能提高其探索的效率。许多具有 A15 型简单立方晶体结构的氢化物被发现具有良好的超导性质,GaH₃是二元体系中最典型的例子,在 120 GPa 下超导转变温度为102K^[1]。在三元体系中,近年来发现的 MgSiH₆、MgGeH₆和 LiPH₆也都具有与 GaH₃ 相似的 A15 型晶体结构,而且他们被计算在 200 GPa 以上均拥有 60K 以上的超导转变温度^[2-4],但他们的稳定压力仍旧非超高。

我们使用先进的晶体结构搜索方法结合第一性原理计算,预测出了在大约一百万个大气压下稳定的 具有 A15 型结构的一系列三元氢化物 AXH₆(MgPH₆、MgAsH₆、CaSbH₆、CaCnH₆、NaSbH₆和 ScSiH₆)。 其中,CaSnH6 的热力学稳定压力最低,为 110GPa。CaSbH₆、CaSnH₆和 ScSiH₆在不考虑(考虑)非谐 效应和温度效应的情况下,最低动力学稳定压力为 41(70)、71(90)和 86(70) GPa。这些 A15 型结构中的氢 原子与 X 原子倾向于形成弱共价键。此外,我们发现当两个非氢原子的化学价态之和为 6 或 7 时,具有 AXH₆化学计量比的三元氢化物在压力下可能呈现 A15 型结构。根据电子-声子耦合计算,所有这些三 元氢化物都被预估为超导体。CaSbH₆、CaSnH₆和 ScSiH₆在 45、75 和 90 GPa 时分别具有 65、53 和 116 K 的超导转变温度(*T*cs),而 MgPH₆在 135GPa 时具有 148K 的最高 *T*c。我们的研究将为设计接近环境 压力的高稳超导三元氢化物提供参考和新思路^[5]。

关键词:超导体;三元氢化物;A15型结构;电声耦合效应;降低压力 参考文献

- 1. G. Gao et al., Phys. Rev. B 84 064118 (2011)
- 2. Y. Ma et al., Phys. Rev. B 96 144518 (2017)
- 3. Y. Ma et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 19 27406-27412 (2017)
- 4. Z. Shao et al., Npj Comput. Mater. 5 238-245 (2019)
- 5. X. Wei, G. Gao* et al., Mater. Today Phys., 34 101086 (2023).

Pressure-Induced Evolution of Superconductivity and Structural Stability in a Bulk 4*H*_b-TaSeS Heterostructure

Yehua Huang¹, Hang Li¹, Xin Yang^{1,*}, Huiyang Gou^{1,*}

¹Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research (HPSTAR), Beijing 100093, China

Email: xin.yang2@hpstar.ac.cn

摘要:

Transition-metal dichalcogenides (TMDs) are characterized by their unique layered structures and diverse electronic properties [1-2]. Recent studies have highlighted the distinctive superconducting and charge density wave (CDW) behaviors of $4H_b$ -TaS₂ and $4H_b$ -TaSe₂ [3-5]. To explore the intriguing characteristics of these structurally modulated compounds, we synthesized $4H_b$ -TaSeS, which alternates between 1*H* and 1*T* layers, and investigated its structural and superconducting properties. At ambient pressure, $4H_b$ -TaSeS displays superconductivity with a transition temperature (T_c) of approximately 3.8 K. Under increasing pressure, T_c decreases to a minimum of around 2.3 K at 37 GPa, followed by a gradual recovery that forms an unusual valley in the T_c -pressure curve. High-pressure synchrotron X-ray diffraction measurements show that $4H_b$ -TaSeS maintains its hexagonal symmetry up to 82 GPa without undergoing any structural transitions. Resistivity measurements also indicate a transition from non-Fermi liquid to Fermi liquid behavior induced by pressure. Further theoretical calculations shed light on the pressure-dependent superconducting mechanism, demonstrating that superconductivity is primarily influenced by Ta atoms, with contributions predominantly from *H*-layer Ta at lower pressures, gradually shifting to *T*-layer Ta as pressure increases. These findings offer valuable insights into pressure-induced superconductivity in TMDs and other complex layered systems.

关键词: Crystal structure, First-principles calculations, Transition-metal dichalcogenides

参考文献

- 1. X. Qian, J. Liu, L. Fu, and J. Li, Science 346, 1344 (2014).
- 2. Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, Nat. Nanotechnol. 7, 699 (2012).
- L. Yan, C. Ding, M. Li, R. Tang, W. Chen, B. Liu, K. Bu, T. Huang, D. Dai, X. Jin, X. Yang, E. Cheng, N. Li, Q. Zhang, F. Liu, X. Liu, D. Zhang, S. Ma, Q. Tao, P. Zhu, S. Li, X. Lü, J. Sun, X. Wang, and W. Yang, Nano Lett. 23, 2121 (2023).
- 4. S. Xu, J. Deng, J. Gao, F. Meng, L. Shi, P. Yang, N. Wang, Z. Liu, J. Sun, Y. Uwatoko, H. Lei, X. Luo, Y. Sun, N. Wang, Z. Wang, B. Wang, and J. Cheng, Phys. Rev. B 109, 144522 (2024).
- 5. Y. Geng, J. Guo, F. Meng, M. Wang, S. Mi, L. Huang, R. Xu, F. Pang, K. Liu, S. Wang, H.-J. Gao, W. Zhou, W. Ji, H. Lei, and Z. Cheng, Phys. Rev. B 110, 115107 (2024).

金属铀高温高压相图的声子非简谐效应

余晓翔、包南云、戴佳钰

¹国防科技大学,理学院,长沙 410073,中国 ²国防科技大学,极端条件物理及应用湖南省重点实验室,长沙 410073,中国 ³国防科技大学,湖南省物态模拟与调控基础学科研究中心,长沙 410073,中国 Email: xxyu@nudt.edu.cn

摘要:

由于锕系金属复杂的电子结构和强声子非简谐性,从第一性原理来理解和预测其相图极具挑战性。 我们研究了高温高压下铀的相图,使用 DFT+U 和热力学积分方法分别考虑电子关联性和声子非简谐性。 热力学积分内禀考虑了全部非简谐效应,结合具有第一性原理精度的机器学习势函数,再现了实验相图。 此外,我们在自洽声子理论的框架内量化了三阶和四阶声子非简谐效应引起的自由能修正,发现了它们 之间的相互竞争关系。三阶和四阶非简谐效应使高压下的α-γ相边界线更接近实验观测值。





关键词:相图,非简谐,金属铀,晶格动力学,热力学积分参考文献

- 1. C. S. Yoo, H. Cynn, and P. Soderlind, Phys. Rev. B 57, 10359 (1998).
- 2. P. Soderlind, B. Grabowski, L. Yang, et al., Phys. Rev. B 85, 060301(R) (2012).
- 3. J. Bouchet and F. Bottin, Phys. Rev. B 95, 054113 (2017).
- 4. J. W. Xian, J. Yan, H. F. Liu, et al., Phys. Rev. B 99 064102 (2019).

Be-Cu 体系机器学习势构建和 BexCuy 合金物性研究

张雷雷

黄河科技学院纳米功能材料研究所 Email: luanzhanglei123@163.com

摘要:

富铍合金成是替代纯铍的重要工程材料,对富铍合金的构效关系和缺陷行为以及间隙局域电子的影响机制进行深入系统的理论研究具有重要科学意义和工程价值。本研究充分考虑化学组份、服役温度和压力、晶体缺陷、界面和尺寸效应等因素来产生数据集,构建了适用于服役条件的 Be-Cu 体系的高精度机器学习势。初步研究表明,常压下富铍的 Be_xCu_y 合金均表现出拓扑 0 维的电子化合物(electride)特征,有序相 Be_xCu_y 合金的主要合金化形式是 Be 单原子取代 FCC-Cu 中某些 Cu 原子,以及 Be 单原子 /Be₄ 原子簇占据 FCC-Cu 中的八面体间隙位。此外,相较于等结构的 CuAl 和 CuZn 合金,B2 型 CuBe 合金可以在-20~100 GPa 范围内稳定存在,具有最优异的结构稳定性。这些结果对我们准确认识和合理利用富铍合金这类重要工程材料具有重要参考价值。



图1常压下有序 BexCuy 相合金的合金化机制示意图

关键词: Be_xCu_y合金; 电子化合物; 机器学习势; 合金化机制; 密度泛函理论计算 参考文献:

- 1. <u>Zhang L</u>*,#, Yang B#, Huang T, et al. *Physica Scripta*, 2024, 99: 065946.
- 2. <u>Zhang L</u>*,#, Yang B#, Wang D, et al. *Results in Physics*, 2024, 58: 107527.

中等压力下 Li3IrH9 稳健的高温超导电性

赵文迪1, 郭淑敏1, 马天成1, 刘正涛1, 李承大1, 段德芳1*, 崔田1,2*

(1. 吉林大学,高压与超硬材料全国重点实验室,物理学院,吉林 长春 130012)
(2. 宁波大学高压物理科学研究院,物理科学与技术学院,浙江 宁波 315211)

Email: duandf@jlu.edu.cn, cuitian@nbu.edu.cn

摘要: 富氢材料作为潜在的高温超导体已成为近年来物理学、材料科学等多学科备受关注的超导材料之一。理论预测并被实验合成的共价氢化物 H₃S 和笼状氢化物 LaH₁₀ 的超导转变温度均突破 200 K, 抓起 了探索富氢高温超导体的热潮。当前研究的重点致力于降低氢基超导体的稳定压力以推动实际应用。本 文基于第一性原理计算结合晶体结构预测, 报道了一类新型氢化物家族 A₃MH₉ (A = 碱/碱土金属; M = 过渡金属), 它们在亚兆巴压力范围展现出优异的超导电性。代表性化合物 Li₃IrH₉ 在 100 GPa 热力学稳 定,并在宽泛的压力范围(8-150 GPa)的 *T*。始终超过 100 K, 最高 *T*。值可达 122 K。这种稳健的超导 电性源自[IrH₈]²-阴离子单元的离域反键轨道与近邻的间隙 H-离子轨道的杂化相互作用,诱导了氢亚晶 格的本征金属性。这不仅在费米能级附近形成氢主导的电子态密度,还通过软化氢的声子模式显著增强 电子-声子耦合。特别是间隙 H-离子的振动对提升电子-声子耦合起了重要作用,即使在高压下仍保持稳 健。此外, 同构的氢化物 Li₃RhH₉、Li₃CoH₉、Ca₃IrH₉ 同样在中等压力甚至环境压力展现出优异的超导 电性。这项工作不仅为探索温和压力下的氢基高温超导体提供了全新的结构原型,还提出了一种新的原 子键合机制以获得稳健的高温超导电性,推动了具有实际应用前景的氢基超导体的理论和实验探索。

关键词: 高压, 第一性原理, 氢化物, 超导电性

参考文献:

- [1] D. Duan, Y. Liu, F. Tian, D. Li, X. Huang, Z. Zhao, H. Yu, B. Liu, W. Tian, and T. Cui, Sci. Rep. 4, 6968(2014).
- [2] A. P. Drozdov, M. I. Eremets, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, Nature 525, 73 (2015).
- [3] F. Peng, Y. Sun, C. J. Pickard, R. J. Needs, Q. Wu, and Y. M. Ma, Phys. Rev. Lett. 119, 107001 (2017).
- [4] A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov, S. P. Besedin, M. A. Kuzovnikov, et al., Nature 569, 528 (2019).
- [5] W. Zhao, X. Huang, Z. Zhang, S. Chen, M. Du, D. Duan, and T. Cui, Natl. Sci. Rev 11, nwad307 (2024).
- [6] W. Zhao, A. Ellis, D. Duan, H. Wang, Q. Jiang, M. Du, T. Cui, and M. Miao, Adv. Funct. Mater, 35, 2415910 (2025).
- [7] W. Zhao, D. Duan, Z. Liu, Z. Huo, S. Guo, D. An, M. Miao, and T. Cui, Sci. China Phys. Mech. Astron. 67, 118211 (2024).
- [8] W. Zhao, S. Guo, T. Mg, Z. Liu, C. Li, D. Duan, and T. Cui, arXiv preprint:2503.04336 (2025).

间隙阴离子电子促进 Li-As 电子化合物的超导性

赵雅娉、张孝华、刘永、杨国春

吉林大学物理学院高压与超硬材料国家重点实验室 燕山大学理学院亚稳材料科学与技术国家重点实验室 Email: yanggc468@nenu.edu.cn

摘要:

在电子化合物中,处于晶格空腔中的间隙阴离子电子(IAEs)具有多样的形态和浓度,能够引发 有趣的物理和化学特性。 理解间隙阴离子电子与电声耦合之间的关系对设计新的电子化合物超导体至 关重要。 在本篇工作中,我们应用第一性原理结构搜索计算,预测了新的高压 Li-As 电子化化物, 例如 *P6/mmm* 对称性的 Li₅As 和 Li₈As, *Cmc*2₁ Li₆As 和 *C*2/*c* Li₆As, *C*2/*m* 对称性的 Li₁₀As 和 Li₁₀Sb 以及已知的电子化合物 *C*2/*m* Li₁₀Te。基于这些电子化合物具有可变的供体含量、结构对称性和受体种 类特征去探究与间隙阴离子电子相关的超导性。 我们的研究结果显示,这些电子化合物的超导转变温 度与间隙阴离子电子的数量和连通性呈正相关。



图 1 三组电子化合物的结构对称性、IAEs 形态、数量和超导转变温度。

关键词: 高压; 电子化合物; 第一性原理计算; 超导

参考文献

Zhao Y, Zhang X,Liu Y, Yang G, et al. Interstitial anionic electrons favoring superconductivity in Li-As electrides [J]. Physical Review B, 2023, 108(10): 104505.

Enhanced electron affinity of xenon in lithium-xenon electrides under high pressure

Weishuo Xu, Wenwen Cui, Yinwei Li

Laboratory of Quantum Functional Materials Design and Application, School of Physics and Electronic Engineering, Jiangsu Normal University, Xuzhou 221116, ChinaEmail: Email: xyz544256949@outlook.com

Abstract:

Noblel gases, due to their closed-shell electron configurations, were once considered chemically inert. Under high pressure, Xe exhibits anionic characteristics, making it more likely to form compounds with alkali and alkaline earth metals.¹⁻³ Using CALYPSO crystal structure prediction and VASP software, the high-pressure phase diagram of the Li-Xe system at 0–100 GPa was determined, revealing four new thermodynamically stable structures: *Cmmm* Li₇Xe, *P2/m* Li₈Xe, *R*-3 Li₈Xe, and *P4/m* Li₉Xe, all exhibiting electride characteristics. Electron-phonon coupling calculations showed that *P4/m* Li₉Xe achieves a maximum superconducting transition temperature of 10.3 K at 70 GPa. The increase in the electron-phonon coupling constant (λ) is primarily attributed to low-frequency Li-Xe interactions causing phonon softening from Γ to M and X, as well as reduced interstitial electron occupancy at the Fermi level. This study provides valuable guidance for exploring novel high-pressure superconducting electride, advancing the fields of inert gas chemistry and superconducting materials.



Fig. 1. The stable structures of Li-Xe compounds and 2D ELF: (a) R3 Li₈Xe, (b) P4/m Li₉Xe. Green and purple spheres represent Li and Xe atoms, respectively.

Keywords: High pressure; Crystal structure prediction; Electride; Alkali metal; Superconductivity References

- 1. Miao M, Wang X, Brgoch J, et al. Anionic chemistry of noble gases: formation of Mg–NG (NG= Xe, Kr, Ar) compounds under pressure[J]. Journal of the American Chemical Society, 2015, 137(44): 14122-14128.
- 2. Zhang S, Bi H, Wei S, et al. Crystal structures and electronic properties of cesium xenides at high pressures[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2015, 119(44): 24996-25002.
- Peng J, Wang S, Dong H, et al. Stability of xenon-sodium compounds at moderately low pressures[J]. Physical Review B, 2024, 109(14): L140103.

CMRR 中子科学平台与高压中子衍射技术

房雷鸣

中国工程物理研究院核物理与化学研究所 Email: flmyaya2008@163.com

摘要:

中子散射技术利用中子与原子核的相互作用来表征原子位置与状态,具有深穿透、同位素及近邻元 素识别、可测量磁结构等优势,在凝聚态物理、材料学、化学、生物学等基础前沿研究以及航空航天等 工程应用领域中均有广泛的应用。中国绵阳研究堆(China Mianyang Research Reactor, CMRR)是国内 三大中子源之一,建有中子衍射、反射、小/超小角、应力/织构、冷/热三轴、自旋回波等 17 台国际先 进中子谱仪,包括国内唯一的中子自旋回波谱仪和超小谱仪,我国首个多功能中子应力-织构谱仪、首 个高压中子衍射谱仪等。CMRR及其中子科学平台自 2014 年建成并投入使用以来,每年对外开放机时 约占 50%,已为国内外科研单位与企业五百余份申请提供束流,在 Nature、Science、PRL、JACS、AM 等期刊发表论文四百余篇。目前世界上先进的中子散射平台,比如 ILL、ISIS、SNS 和 J-PARC等,都 建有专门的高压中子衍射谱仪或站,用于地球科学、武器物理、新材料及能源等方面的研究。CMRR 中子科学平台的高压中子衍射(凤凰)谱仪是国内首台高压加载中子衍射谱仪,由中子聚焦系统、探测 器系统、高压加载与集成系统等部分组成,可进行常规、高/低温、高压环境下的中子衍射实验,利用 巴黎-爱丁堡压机(Paris-Edinbrugh press)可实现压力加载达到 30 GPa 以上。凤凰谱仪已在过渡金属氮 化物、锂离子材料、磁性材料、含能材料、铁电陶瓷等多个研究领域开展工作,利用常温常压、高/低 温及高压中子衍射技术,给出了这些材料的原子精确占位、磁结构、晶体结构及相变等信息,为国防科 研及基础研究提供支撑。

关键词:中子源;高压中子衍射技术;中子衍射谱仪;巴黎-爱丁堡压机;结构相变 参考文献

- L. Fang, et al., New single-toroidal sintered diamond anvil and assembly for high pressure neutron diffraction, Nuclear Analysis, 4 (2025) 100142
- 2. Q. Hu, et al., Enhancing the pressure limitation in large-volume Bridgman-anvil cell used for in situ neutron diffraction,
- 3. High Pres.Res., 39 (2019) 655-665
- L. Xie, et al., Fenghuang: high-intensity multi-section neutron powder diffractometer at CMRR, Nuclear Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A, 915 (2019) 31-35
- 5. 房雷鸣等, CMRR 中子科学平台的高压中子衍射技术及应用, 高压物理学报, 34 (2020) 050104
- 6. 孙嘉程等,中国绵阳研究堆高压中子衍射谱仪在材料研究中的应用,高压物理学报,38(2024)030111

冲击高温高压状态下过渡金属电导率的测量技术

张友君

四川大学原子与分子物理研究所 Email: zhangyoujun@scu.edu.cn

摘要: Shock compression rapidly generates extreme pressure and temperature conditions, commonly observed during natural meteorite impacts, hypervelocity impacts, explosive detonations, and high-powered laser shocks. Such conditions can induce ultrafast physical and chemical transformations in materials. However, the transient nature of shock compression severely limits in situ measurements of material properties. In this study, we develop an advanced method for measuring the electrical conductivity of metals subjected to shock compression using gas-gun experiments, explicitly accounting for skin depth effects and significantly enhancing the signal-to-noise ratio. Furthermore, by integrating a pre-heating system, we successfully acquired electrical conductivity data under off-Hugoniot conditions. Utilizing this new methodology, we have measured the electrical conductivity of metals and alloys, such as copper and vanadium, at pressures exceeding one megabar and temperatures near 2000 K.

关键词:冲击、高温高压、金属、电导率、实验技术参考文献

- Bo Gan, Jun Li, Junjie Gao, Qiru Zeng, Wenhao Song, Yukai Zhuang, Yingxin Hua, Qiang Wu, Gang Jiang, Yuan Yin, and Youjun Zhang. Electrical conductivity of copper under ultrahigh pressure-temperature conditions by both experiments and first-principles simulations. Physical Review B, 109, 115129 (2024);
- 2. Yang Wang, Jun Li, Junjie Gao, Yifeng Zhang, Wenhao Song, Bo Gan, and Youjun Zhang. Measuring the electrical resistivity of vanadium across the shock-induced phase transformation. Physical Review B 111, 134101 (2025)

动态载荷下的先进原位多尺度诊断技术及其应用

陈森、胡建波

中国工程物理研究院流体物理研究所 Email: senchen02@163.com

摘要:

近年来, 传统轻气炮、强激光、磁驱等系列动态加载装置与先进 X 射线光源如同步辐射、自由电 子激光装置的结合, 为极端高压、高应变率载荷下材料的内部多尺度动态行为研究提供了重要的推动。 利用高能、高重频、强穿透的 X 射线脉冲, 可以进行原位的 X 射线衍射、散射、成像诊断研究, 使得 在不同时空尺度上获取材料内部动态变形、损伤、相变机制与耦合机理成为可能。本报告以同步辐射、 自由电子激光为例, 结合激光、轻气炮、杆等动态加载手段, 对先进原位多尺度诊断技术及其应用现状、 发展趋势进行介绍。

关键词: 同步辐射, 自由电子激光, 动态加载, 金属, 变形, 相变

低温高压原位光谱测量系统的研制及应用

雷力*、吴彬彬

四川大学 原子与分子物理研究所 Email: lei@scu.edu.cn

摘要:

高压光谱学是研究高压相变、高压化学反应机理、高压下材料的物性的重要原位实验测 量手段。目前大多数高压光谱研究主要在室温条件下进行,而低温高压光谱实验主要以高压 冷却降温为主的研究手段。由于设备和技术等方面的限制,在低温等温压缩的条件下开展高 压原位光谱测量的研究仍相对较少。因此,开发低温等温压缩下进行光谱测量,不仅可以通 过实验确定 P-T 斜率较大相边界,还可以研究低温条件下声子等元激发对压力的响应特性。

我们的研究团队面向低温高压原位光谱测量的实验需求,自主设计发展研制了一套低温高压原位光谱测量系统。利用该系统,我们首次通过实验确定了四种典型半导体材料(ZnO,GaN,AIN和LiGaO₂)在低温下的B4-B1相界,并获得了相应的负克拉珀龙斜率参数及其与熵的密切关系¹。同时我们还利用该系统揭示了低温下ZnS的B3-B1相边界和声子模的温度和压力依赖性²。此外,我们的研究团队在自主设计搭建的综合极端条件光谱平台上,沿着四条独立的*P-T*实验路径首次获得了U₃O₈的低温高压谱学数据,给出了U₃O₈的*P-T*相图³。我们还在低温高压下揭示了应力诱导的金刚石荧光与温度和压力之间的关系,并进一步探讨了电子-声子相互作用对金刚石能隙的影响⁴。

低温高压等温压缩光谱测量技术的发展,为高压低温物态研究、相变探索及行星物理研 究提供了实验技术支撑,对高压科学与技术、激光光散射谱学、凝聚态物理、材料科学、地 球与行星科学等领域的前沿研究具有重要意义。

关键词: 高压低温实验技术; 拉曼光谱; 半导体相变

参考文献

- 1. B. Wu, Y. Li, Y. Lin, et al., Appl. Phys. Lett. 2025, 126: 112109.
- 2. B. Wu, Y. Lin, Y. Li, et al., Appl. Phys. Lett. 2025, 126: 102103.
- 3. Y. Wang, B. Wu, J. Liu, J. Raman Spectrosc. 2024, 55(9): 997.
- 4. Y. Li, B. Wu, J. Liu, et al., Solid State Commun. 2024, 390: 115609.

专题代号: E

压力工程调控光增益行为:从多体系自发辐射

到钙钛矿放大自发辐射的阈值演化

李帅锜*、唐鑫、李林睿、张丁可

重庆师范大学物理与电子工程学院 Email: <u>talike@cqnu.edu.cn</u>

摘要:

片上微纳激光光源凭借其微尺寸、优异单色性、动态可调谐、高能量效率及低功耗等特性,在光计 算、光通信与激光显示领域展现出广阔的应用前景。我国"十四五"科技创新规划进一步强调了激光光源 微型化与综合性能提升的战略需求,这使得突破增益介质光放大性能瓶颈成为关键科学问题。值得注意 的是,作为独立于化学组分与温度调控的热力学参量,压力可为实现光增益介质的理性设计与性能优化 开辟全新路径。放大自发辐射(ASE)作为一种介于非相干发光与受激辐射之间的准相干发光现象,被视 作评估光增益材料激光阈值特性的关键判据。尽管高压下的自发辐射发光已获得系统研究,但目前高压 ASE 调控及其增益机制解析仍属空白领域,严重制约了极端条件下光增益介质的优化探索。本研究通 过自主搭建的低成本多用途脉冲激光光谱系统,创新性地实现了高压原位自发辐射与 ASE 信号的协同 探测。以 Hg 掺杂 CdI2层状晶体(CdI2:Hg)、四苯基膦锰氯配合物(TPP2MnCl4)及甲基铵铅溴钙钛矿 (MAPbBr3)薄膜为模型体系,首次揭示了钙钛矿薄膜在高压下的光增益性能优化过程。

以上研究结果证实了高压优化钙钛矿材料激光增益性能的可行性和有效性,为微纳激光光源在高压 下的实现和探索提供了新的窗口。

309
综合极端条件实验装置一高温高压大体积材料研究系统

刘兆东、朱品文、杨新一、邹勃、刘冰冰、周强

吉林大学综合极端条件高压科学中心、高压与超硬材料全国重点实验室

Email: liu_zhaodong@jlu.edu.cn

摘要:

国家重大科技基础设施"综合极端条件实验装置"是国际上首个集"极低温、超高压、强磁场和超快光场"等极端条件为一体的用户实验装置,为研究和发现新物态、新现象、新规律和创造新材料提供综合极端实验条件,由中国科学院物理研究所和吉林大学共建,2025年2月26日通过国家验收。吉林大学负责建设的国家重大科技基础设施"综合极端条件实验装置一高温高压大体积材料研究系统"是国际规模最大、指标先进的高温高压极端条件前沿材料研究平台,投资规模1.92亿元,建筑面积 6000 平方米, 由固体环境高温高压、液体环境高温高压、非平衡高压极端条件三大子系统和高压用户辅助实验室组成, 在大腔体快速增压体、液体高压原位监测和碳化钨超高压高温产生的技术水平达到国际领先,国际上首 次制备出超硬非晶碳块材、陨石中的超级钻石"六方金刚石",在纤维增强钨基复合材料以及高压诱导 发光材料等方面研究取得突破,为"科学研究向极端条件迈进,不断突破人类认知边界"提供了源头创 新的装置和技术支撑。

关键词: 高温高压、大体积材料、固体、液体、非平衡

专题代号: E

高压下材料变形的原位研究

王李平

南方科技大学

探究材料在高压下的变形行为对于包括力学、材料科学、地球和行星科学、以及工程学 在内的各个领域都至关重要。近些年由于适合于变形实验的新型压机的不断涌现,而且这些 压机可以与同步辐射光源和中子源等大型科学设施相结合,使高压下的变形实验研究取得了 较快的发展。传统的高压变形实验缺少对样品在加载和变形过程中的实时原位的观测,因此 不能获取样品颗粒度、微观应力、应力-应变关系动态变化等材料变形的关键数据,也很难 得到样品中的实时应力分布。通过同步辐射X光和中子束等原位探针技术,可以对上述样 品信息进行实时监测。通过分析衍射峰的位移与展宽,可以量化晶体内部不同晶面的微观应 力状态,揭示位错、孪晶等微观缺陷在高压作用下的产生、增殖及演化规律,从而理解材料 变形的微观机制;通过射线吸收谱成像可以获取样品的尺寸、应变和应变速率;利用基于衍 射的全场成像技术可以检测应力分布。本报告将着重介绍应用于材料变形研究的多砧大腔体 压机和先进原位探针技术,并以实例展示高压下材料变形原为研究的重要性。

应用于高压超导研究的高压量子传感与超快光谱技术

于晓辉

中国科学院物理研究所,100190 北京,中国

摘要:高压作为目前寻找高温超导的重要研究手段,在探索富氢高温吵到体系以及镍基高温 超导体系中均发挥了重要的作用。但是以往的高压超导调控研究主要集中于电学,即零电阻 的测量;受到高压磁测量的限制,高压超导抗磁测量受到极大程度的限制,这使得诸多高压 超导的研究受到一定程度的质疑。另外,高压超导机制的研究由于受到研究手段的限制,很 难深入的进行,这就导致了高压超导物理很难开展。针对上述问题,我们开发了超高压量子 传感技术,部分解决了高压超导抗磁测量的问题;另外,我们开发了高压低温超快光谱技术, 实现了部分超导参数的测量,实现了高温超导机制的探索。这两种技术被在富氢超导以及镍 基超导体系中得到了很好的验证。

参考文献:

1. https://arxiv.org/abs/2410.10275.

2. Meng Y. et. al.;"Density-wave-like gap evolution in La3Ni2O7 under high pressure revealed by ultrafast optical spectroscopy" **Nat. Comms.** 15, 10408 (2024).

3. Wu Y. et. al.; "Ultrafast dynamics evidence of strong coupling superconductivity in LaH10±δ" Nat. Comms. 15, 9683 (2024).

上海光源 BL12SW 线站大压机实验站介绍及其在高压科学中的应用

周春银、杨科、董朝晖、赵子龙、曹赛超

中国科学院上海高等研究院·上海同步辐射光源 Email: zhoucy@sari.ac.cn

摘要:

上海光源超硬多功能线站 BL12SW,是上海光源二期线站工程中专用于高能 X 射线衍射和成像实验的线站,兼用白光和单色光两种模式,单色光最高可达 160 keV。线站采用一线四站设计,其中两个大压机实验站主要聚焦于行星地球内部物质和新型材料在极端高温高压条件下的结构和性质的原位表征。大压机实验站 LVP1 和 LVP2 分别配置先进的 200 吨 DDIA 压机和 2000 吨双模(DDIA 和 Kawai)大压机,结合同步辐射 X 光可以开展高温高压下的相变、状态方程、流变、物性测量和超高压原位实验,是国内第一个同步辐射原位大压机综合性实验站。自 2024 年开始面向用户正式开放运行以来,国内大压机用户利用上海光源 BL12SW 线站大压机实验站,开展了广泛的高压实验,并取得了初步的成果。随着线站软硬件的不断优化升级,将为国内大压机高压用户提供更好的实验条件,逐步达到国际先进水平。



图 1 超硬多功能线站 BL12SW 示意图

关键词:上海光源,同步辐射,大压机,高温高压,原位

参考文献

 Ke Yang, Zhao-Hui Dong, Chun-Yin Zhou, Zi-Long Zhao, Dong-Xu Liang, Sai-Chao Cao, Ai-Guo Li, Ultrahard X-ray multifunctional application beamline at the SSRF. Nuclear Science and Techniques 35, 98 (2024). https://doi.org/10.1007/s41365-024-01468-4

南科大─散裂源高压中子谱仪与极端条件平台最新建设进展

及规划

<u>朱金龙</u>

南方科技大学

Email: zhujl@sustech.edu.cn

高压中子谱仪平台作为深圳市"材料基因组大科学装置平台重大科技基础设施"的重要 组成部分,具备国际先进的高精度和极端条件下的材料结构表征能力,为新材料、新能源、 生物医药、电子科技等领域的材料研发提供支撑。位于广东省东莞市的中国散裂中子源是我 国"十一五"国家重大科技基础设施,是国内唯一的飞行时间脉冲中子源,具有高通量、高灵 敏、高品质的源特性,基于其建设的"高压中子谱仪"处于国内领先水平。

高压中子谱仪的特点和优势在于它可以实现在超高压、(极)低温、强磁场等综合极端条件下的中子衍射与成像功能,并能开展在不同压力、温度、磁场等极端条件下的力、热、声、 光、电等物理量的多模式原位协同测量。与国际同类型装置相比,在核心谱仪参数与样品环 境功能等方面,高压中子谱仪的综合技术指标处于世界一流水平,在衍射与成像双模式功能、 超高压、(极)低温、强磁场综合极端样品环境等方面处于国际领先水平,其主要技术指标为 高温高压(P_{max}=30 GPa, T_{max}=2600 K)、低温强磁场(B_{max}=9 T, T_{min}=25 mK)和高压渗流 (孔隙压: ≤150 MPa, 围压:≤200 MPa, 偏应力:≤300 MPa, 样品温度: 270 K≤T≤370 K)。

高压中子谱仪建成之后(于 2024 年 7 月 3 号出束, 11 月 28 号首个样品, 2025 年常压、 低温、气液压腔已经调试完毕; PE、ZAP、大压机正在调试; 极低温磁场高压预计年底完 成),不仅能实现在常规条件下的衍射与成像功能,还可以在各便携式 (Portable & Transferable)的极端实验系统和装置之间的灵活切换,如:高温高压真三轴、高压低温活塞 -圆筒缸渗流设备、气/液高压实验装置、强磁场(极)低温便携式六面顶压机、及强磁场(极) 低温两面顶压机等。重点研究与能源和环境相关的新材料、新工艺、新技术、新应用,满足 国家创新发展的重大需求,包括: 氢能应用中燃料电池及储氢材料研发,电池储能材料的高 效增益;高温超导机理与节能降耗应用;多铁耦合机理与电磁节能材料的研发;热电材料研 究与工业废热利用;超硬超强金刚石刀具与钻齿制备及优化;纳米晶及非晶材料研究及节能 潜力开发;甲烷气体水合物可燃冰的开发,水文地质结构稳定性与环境灾难防范;二氧化碳 的捕获、分离、封存及再利用;以及多尺度多组分油气水的孔隙渗流观测、分析与预测等等。

Kinetic control of high pressure phase transitions in anatase TiO₂

XiaoHui Chen, Yi Zhang, Lei Liu, Shijia Ye, Shourui Li, Qiumin Jing, Junjie Gao,

Hao Wang, Chuanlong Lin, Jun Li, and Qiang Wu

National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Mianyang, Sichuan 621900, China

Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research, Beijing 100094, China Email: <u>lijun102@caep.cn</u>, wuqianglsd@163.com

摘要:

Understanding the interplay between the thermodynamics and kinetics of phase transition under high pressure is a current challenge in material and physical sciences. Here, we present the structural response of anatase TiO₂ up to 20 GPa and over compression rates ranging from 0.03 to 3.61 GPa/s, using a piezo-driven dynamic diamond anvil cell coupled with time-resolved Raman spectroscopy. It is found that the phase evolution of anatase TiO₂ follows the expected thermodynamics path (i.e., anatase $\rightarrow \alpha$ -PbO₂ \rightarrow baddeleyite) regardless of the applied compression rate, however, the formation conditions of high pressure phases are kinetically controlled. Both phase boundaries increase approximately linearly with the logarithm of compression rate, that seems to resolve apparent contradictions between previous high pressure results. We ascribe these to the sluggish transition kinetics of a typical reconstructive transition mechanism, and highlight that the compression rate behaves as the third dimension within a high pressure phase diagram.



关键词: rapid compression, kinetics of phase transition, Time-resolved Raman spectroscopy

高压专用衍射线站建设情况及后续初步设想

李守瑞

中物院一所

lishourui1203@163.com

摘要:针对高压专用衍射线站,介绍进展情况及测试指标,对后续平台能力提升提出展望。

超高压研究对特种金刚石对顶砧的急迫需求

<u>王霖</u>

燕山大学, 亚稳材料全国重点实验室, 高压科学中心 Email: linwang@ysu.edu.cn

摘要:

压强是一个独立于温度和组份的基本物理参量。在高压作用下,凝聚态物质不仅体积会被压缩,其 晶体结构、分子结构、电子结构、元素价态乃至电子自旋态,都会发生一系列转变,同时伴随着各种新 奇物理现象的出现[1]。大量的高压实验研究表明,在压力每增加 100GPa 的过程中,每个物质将平均发 生约 3-4 次结构相变,突显了高压研究中追求更高压强的科学重要性和必要性。高压科学实验研究主要 受限于极限压强。而极限压强主要取决于压砧材料的力学性质和几何设计。毛河光院士在上世纪70-80年代,设计了倒角单晶金刚石压砧,把静高压装置的极限从 30GPa 逐步提升到 300GPa,大幅拓展了 20世纪末的高压研究。随着近年静态高压科学与技术的发展,人们已经可以利用金刚石压砧对物质在 高达四百万大气压下的多种物性进行研究,并发现了许多高压力下的新奇的物理和化学现象。然而超过 400GPa 的实验研究不仅鲜有报道, 甚至仅有的几个报道也是受到一些同行的质疑[2]。关键缺陷有: 一、 压强标定的准确性存在很大争议,压强记录的精确度有待进一步确认:二、样品体积极小,厚度仅为亚 微米量级,因此对结构和状态方程等研究造成极大困难:三、实验操作复杂,实验结果很难得到重复和 验证。因此目前压强极限 400GPa 一直没有获得真正突破, 迟滞了人类对更高压强范围进行探索的脚步。 然而,在 400GPa 以上压强范围存在许多重大科学问题和未解的科学之谜正待我们去揭示和解决。如: 实现固体氢的压致金属化一直被奉为高压研究的"圣杯"[3],经过将近一个世纪的努力,人类在400GPa 压强下仍然没有观察到氢的压致金属化现象[4]。最新理论计算表明,氢的金属化压强约为 500GPa [5], 有待高压实验的验证,因此科学家们都翘首企盼着静高压技术瓶颈的早日突破。本报告将回顾金刚石对 顶砧的发展历程和重要讲展。

关键词: 高压、金刚石对顶砧、压强极限、纳米孪晶金刚石

- 1. Mao et al., Review of Modern Physics, 2018, 90, 15007.
- 2. Dubrovinsky et. al., Nature Commun., 2012, 3, 1163.
- 3. Wigner and Huntington, J. Chem. Phys. 3, 764 (1935).
- 4. Loubeyre et al., Nature 577, 631-635 (2020).
- 5. Wang et al., Adv. Funct. Mater. 2024, 2411463.

专题代号: E

强激光高压物性实验平台研究进展

王哲斌、段晓溪、刘浩、杨为明、章欢、刘东晓、张琛、理玉龙、关赞洋、

刘永刚、孙奥、车兴森、王峰、杨冬、杨家敏、赵宗清

中国工程物理研究院 激光聚变研究中心 Email: zhebinw@vip.sina.com

摘要:(摘要正文,中文,宋体五号字,其中英文和数字为 Times New Roman 五号字)

高能激光能在 10⁻¹⁵~10⁻⁸s 极短的时间尺度内将千焦耳到百万焦耳能量沉积到毫米尺度内的微小空 间尺度内,因此能产生 10⁹~10¹⁴ Pa 的宽区高压、高温、高密度等极端物质状态;同时大型激光装置上 发展出了先进 X 光诊断技术,它与传统的运动学量或热力学量测量技术的结合使得激光实验平台具有 宏观参量和原位微观结构的同时测量的能力。这些能力为极端条件物质性质的实验研究提供了重要的基 础,为此世界上各主要高能激光装置上将极端高压物性实验作为重要研究方向推动发展。激光聚变研究 中心建立了万焦耳量级和十万焦耳级量级等世界先进水平的高能强激光装置,它们为国内强激光加载极 端高压物性实验研究提供了关键的基础。

在这些高能激光装置上,团队在宽区高压状态的可控加载和精密表征两方面进行了系统研究:建立 了冲击 Hugoniot、准等熵以及"冲击+准等熵"的多种热力学路径的高压加载技术,实现了覆盖百 GPa(10¹¹Pa) 固相到 TPa(10¹²Pa)以上等离子体状态的宽区高压状态加载能力;建立了精密应力波速度、 界面温度和物质密度测量等宏观状态测量技术,发展了基于 X 射线衍射和吸收测量的微观结构测量技 术,形成了宏观状态-微观结构联合测量的多尺度实验研究能力。

为了适应大型激光装置工程规模的实施特点,针对高压物性的学科需求和特点,联合激光、制靶等 支撑技术,我们以实验平台为载体高能激光装置上开发了高压状态方程、相变和强度等多类物性实验平 台。本报告介绍了状态方程实验、相变等实验平台研究进展,通过应用实例,展示了当前实验平台的研 究能力现状。

目前我所将高压物性作为万焦耳激光装置的特色而大力推进。热忱欢迎感兴趣科研人员参与到我们高能激光高压物性实验平台建设及应用,共同推动国内极端高压物性研究方向的发展。

318

四代光源高压非弹性散射谱学方法介绍

徐伟

中国科学院高能物理研究所,北京同步辐射装置/高能同步辐射光源

摘要

硬 X 射线高能量分辨谱学特指一类非弹性 X 射线散射谱学技术,是研究物质各类量子态激发的利器。得益于高亮度光源、高精度光学、探测技术的发展,非弹性 X 射线散射谱学在物理、材料、化学、生命科学等多学科领域取得了若干显著的成果。非弹性 X 射线散射谱学方法与高压技术深度结合,助力地学、行星科学、高压超导物理的前沿研究。 基于先进的第三代光源,非弹性 X 射线散射谱学的潜力得以释放,在研究同位素分馏、硅-氧化学成键,高压水的奇特物相结构等方面,发挥了独特且至关重要的作用。

高能同步辐射光源是我国首台具有极高亮度、高相干性的第四代光源。依托高能同步社 光源,高能量分辨谱学(ID33)线站,充分发挥第四代光源优势,提供先进的核共振散射、X 射线拉曼散射谱学、共振 X 射线散射谱学实验方法。本报告将着重介绍三类非弹性散射谱 学方法,以及 HEPS 光源上 ID33 的线站方案及建设进展情况,以期为我国高压科学领域学 者提供更多杀手锏利器,推进相关基础研究前沿。

Development of a multi-anvil apparatus for synergetic extreme condition physics

Yoshiya Uwatoko^{1*}, Kento Ishigaki¹, Taketora Mikuri¹, Shoko Nagasaki¹, Jun Gouchi¹,

Jianping Sun², Hanming Ma², Bosen Wang², Jinguang Cheng²

¹Institute for Solid State Physics, University of Tokyo, Kashiwa, Chiba 277-8581, Japan

²Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics and Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

The application of high pressure that shortens the interatomic distances in a controllable manner has been widely used to explore emergent quantum phenomena in correlated electronic materials. Precise measurement of physical properties at synergetic extreme conditions including high pressures, low temperatures, and/or strong magnetic fields, is not an easy task since these extreme conditions usually exert severer constraints on the measurement techniques. In particular, it is quite challenging for physical property measurements at low temperature and hydrostatic pressure conditions. In this talk, we will introduce the cubic anvil cell and 6-8 multi-anvil pressure devices that are capable of providing excellent hydrostatic pressures over 15 GPa and relatively large sample space for precise physical properties measurements at synergetic extreme conditions. We will also present some recent research progresses on the exploration of novel quantum materials and phenomena by using these multi-anvil apparatus.

*Faculty of Science and Engineering, Tokyo City University, Setagaya, Tokyo 158-8557, Japan

厘米级腔体流体样品的高温高压长时稳定封装与反应处理

杜明浩、贺端威

四川大学物理学院原子与分子物理研究所 Email: 1173846770@qq.com

摘要:

对于室温常压下的气态样品,已经开发出了成熟的封装技术,可将其封装在金刚石对顶砧中。然而, 大腔体压机只能处理起始材料为固态的样品。我们通过采用低温冷冻和快速压缩加压密封的方法对组装 件进行处理,实现了在温度高于 1500 K 和压力超过 5GPa 的条件下,将二氧化碳稳定封装并进行反 应处理长达 10 分钟以上,且样品室尺寸达厘米级。该技术还可应用于大腔体压机装置中其他气态或液 态样品(如氨、二氧化硫、水等)的封装。

关键词: 大腔体压机、流体样品

专题代号: E

水镁石高压变形及电学响应

高文佳、刘锦、邓奥、徐良旭、杨国春、田永君

燕山大学高压科学中心 Email: <u>JinLiu@ysu.edu.cn; 17649850351@163.com</u>

摘要:

基于全球大地电磁测深数据,板块汇聚边缘的俯冲系统呈现多层级电性结构特征,其中不同深度域 的高导异常蕴含着关键的地球动力学信息。传统解释模型认为:15-20 公里以浅的浅层高导异常主要源 于沉积物压实过程中孔隙水的排出作用;弧下深度>90 公里的深部异常则与蛇纹石、滑石等含水硅酸盐 矿物的脱水反应密切相关,高温高压实验证实这些矿物在 400-600°C 温压条件下发生分解并形成部分熔 融体。近年观测数据显示,在冷俯冲带中普遍存在 30-70 公里深度的显著高导异常;然而,该深度高导 异常结构的特殊性在于:冷俯冲板片温度在 200-300°C 左右,远低于叶蛇纹石(>400-500°C)和滑石 (>600-700°C)脱水温度,以致传统脱水模型难以解释高导异常体的空间连续性和电导率量级。我们在 燕山大学高压科学中心新引进的六轴压机上,设计并同步开展高温高压变形与电学性质测量实验,通过 揭示俯冲带重要含水矿物水镁石的高压变形特征及其对电学性质的影响规律,为破解俯冲带弧前 30-70 公里深度的高导异常成因之谜提供了全新的线索。

关键词: 含水矿物, 电导率, 高温高压, 变形, 俯冲带 参考文献:

 Weibin Gui, Jin Liu*, Ao Deng, Jun Hu, Penghui Sun, Changzeng Fan, Fahui Xiong*, Sublattice disorder and Fe-Mg substitution in brucite: Implication for the subduction-zone water cycle, 2025. American Mineralogist, 110, https://doi.org/10.2138/am-2024-9646

专题代号:X

meV-IXS 实验技术及其在声子探测中的应用

郭志英、徐伟、李晓东

中国科学院高能物理研究所 Email: zyguo@ihep.ac.cn

高能量分辨非弹性 X 射线散射 (meV-IXS) 技术经过四十多年的发展,现已被视为因同步辐射光源 先进性而产生的最成功的科学领域之一¹。不仅能够探测材料的声速、声子态密度和声子色散关系,还 在非晶、液体和非平衡态系统等基础研究方面做出了显著贡献,被广泛认为是研究材料原子动力学的重 要工具 ^{2,3}。

在高压领域,该技术可以研究富氢高温超导体中的声子谱和声子色散关系,为金属氢研究提供进一步佐证。另一方面还可以探测压力诱导下的电荷密度波序与超导共存和竞争现象,为深入理解自旋序、 电荷序与超导电性之间的微观联系提供了新线索。

HEPS 二期正在考虑建设一条探测材料低能元激发的 meV-IXS 光束线。该线站将充分利用第四代同步辐射光源的高亮度和优异的聚焦性能,结合大型罗兰圆谱仪和分析晶体阵列,实现材料声子色散曲线的高效探测,为量子材料、强关联体系等前沿科学研究提供助力,并对我国的基础研究和科技进步提供强有力的支撑。



图 1. 非弹性 X 射线散射探测各种能量转移范围内的元激发

关键词: 高能量分辨非弹性 X 射线散射 (meV-IXS), 声子色散关系, 电荷密度序; 参考文献

1. E. Burkel, et al., Rev. Sci. Instrum. 60, 1, 1671-1673 (1989)

2. H.-H. Kim, Science 362, 1040-1044 (2018)

3. Saizheng Cao, Nature Communications 14:7671 (2023)

(备注: 专题代号为拟参加会场编号, 主题: E. 高压实验技术)

专题代号: E

高能同步辐射光源高压线站建设进展

李晓东、刘景、李延春、杨栋亮、宫宇、张飞、董伟伟

中国科学院高能物理研究所 Email: lixd@ihep.ac.cn

摘要:

高能同步辐射光源(High Energy Photon Source, HEPS)作为我国"十三五"期间建设的、为国家 重大战略需求和前沿基础科学研究提供技术支撑平台的国家重大科技基础设施,于 2017 年 12 月获得国 家发展改革委批复立项,并于 2019 年 6 月在北京怀柔奠基启动建设。HEPS 一期建设线站已于 2025 年 4 月进入全面联调阶段,并将于 2026 年投入开放运行。

高压线站(HPB)是 HEPS 一期工程中建设的线站之一,作为专用的高压研究线站,HPB 建成后将以衍射方法为主,提供多种原位环境和实验手段为极端条件领域科研用户提供研究助力。本报告将对目前 HPB 近期的建设和调试进展进行介绍。

关键词:高能同步辐射光源、高压线站, High Energy Photon Source, high-pressure beamline

基于稳御(MASTer)加热系统的超高温和 7/3 组装的超高压产生

<u>牛国梁</u>¹、蔄廉洁²、Tomoo Kasura^{2*}、缑慧阳^{1*}

1 北京高压科学研究中心

2 Bayerisches Geoinstitut, University of Bayreuth

Email: guoliang.niu@hpstar.ac.cn

大腔体压机是一种广泛应用于模拟行星内部、合成新型材料以及研究极端条件下的材料性质的高压 高温设备。与金刚石对顶砧相比,大腔体压机的主要优势是能够在大体积样品中提供稳定、均匀的压强 和温度,这对于一些要求长时间保持高温高压的实验至关重要。

在常规实验室条件下,大腔体压机中能达到的高压高温条件普遍被限制在约 25 GPa 和 2200°C;纵然一些实验能够在 6/1.5 组装中产生超过 40 GPa 的高压,但其能容纳的样品体积也缩小了一个数量级。LaCrO₃加热体可以被加热到 2600°C 以上,但在加热初期随着温度上升电阻呈指数型下降,常规的加热系统不能很好地控制这个过程。这些技术困难限制了地球科学、材料科学的进一步研究。基于以上问题,我们开发了在 7/3 组装中产生超过 40GPa 的超高压技术,其样品体积能够大于 1 mm³,比以往的样品尺寸大了一个数量级。我们还开发了一套稳定、精密、适应性强的大腔体压机加热系统(稳御/MASTer),能够很好地加热 Re,LaCrO₃,石墨和 TiB₂ 复合材料加热体,其典型功率波动不超过±0.1 W,加热腔体内的温度波动小于±2°C;利用 LaCrO₃ 加热体,我们在约 14 GPa 条件下产生了超过 2800°C 的高温,并且能够在 2600°C 稳定保持加热。



图 1. (a) MASTer 加热系统机柜外观与结构; MASTer 应用于 5.7/1.5 组装铬酸镧加热的(b)温度、电阻随 功率关系和(c)温度、功率随时间的波动; (d) 优化后的 7/3 组装加压效率和(e)本研究在大腔体压机体积 与所产生最高压力关系图中的投点。

关键词: 大腔体压机; 高温高压; 加热系统; 压力产生;

荧光类二级压标红宝石、Sm²⁺:SrB₄O₇和 Sm³⁺:YAG 在 55 GPa 和 850 K 下的修正

魏颖展、周强、张才姿、李亮、李新阳、李芳菲

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: yzwei22@mails.jlu.edu.cn

摘要:

近年来,荧光类二级压标,如 Cr³⁺:Al₂O₃(通常称为红宝石)、掺二价钐的四硼酸锶(Sm²⁺:SrB₄O₇) 和掺三价钐的钇铝石榴石(Sm³⁺:YAG)等,其由于荧光信号强、荧光峰位对压力的依赖性敏感、操作 简单等优势,常作为光学表征测试中的压力标定物。我们使用电阻外加热 DAC 技术、拉曼光谱和荧光 光谱对上述三种荧光压标进行了温度和压力范围分别为 296-850 K 和 0-55 GPa 的校准,给出了一种可 同时在高温常压、常温高压和高温高压下准确适用的统一修正关系。比较三种荧光压标,红宝石具有最 强的信号强度和最高的温度敏感度,而 Sm²⁺:SrB₄O₇和 Sm³⁺:YAG 则具有较低的温度敏感度、更宽的使 用温度范围以及在高温高压下的更好光谱质量,特别是具有一条尖锐的高强度单峰λ₁的 Sm²⁺:SrB₄O₇。 考虑到每种压标在高温高压下的荧光峰产生的偏移,即使是低温度敏感度的 Sm²⁺:SrB₄O₇和 Sm³⁺:YAG, 在高温高压下进行压力校准时也需考虑温度效应和温度压力的耦合,否则在整个高温高压范围内将引起 较大偏差。¹⁻³



图 1 : (a) 高温高压下 Sm²⁺:SrB₄O₇的 λ_1 峰随压力变化及实验数据与各等温线拟合结果的偏差。 (b) λ_1 峰高温高压下数据与室温高压校准之间的偏差,最大约为 2.5 GPa。

关键词: 高温高压、电阻外加热、金刚石对顶砧、二级荧光压标、压力修正 参考文献

1. Y. Wei, Q. Zhou, C. Zhang, L. Li, X. Li and F. Li, Journal of Applied Physics 135 (10) (2024).

2. G. Shen, Y. Wang, A. Dewaele, C. Wu, D. E. Fratanduono, J. Eggert, S. Klotz, K. F. Dziubek, P. Loubeyre, O. V. Fat'yanov,

P. D. Asimow, T. Mashimo and R. M. M. Wentzcovitch, High Pressure Research 40 (3), 299-314 (2020).

3. F. Datchi, A. Dewaele, Y. Le Godec and P. Loubeyre, Physical Review B 75 (21) (2007).

专题代号: E

高压变温(4-4000 K)热导率的测量方法及应用

岳冬辉

黑龙江超硬材料省重点实验室 Email: 15104409336@163.com

摘要:

技术创新是科学发展的源动力,在高压科学领域,技术创新的重要性尤为突显。高压热导率的研究 对于超导理论的解析、功能材料性能的优化以及地球内部动力学过程的认知至关重要,然而,时至今日, 高压低温、高温高压热导率的原位测量仍然是高压科学领域公认的技术难题。以Fe的高温高压热导率 研究为例:地球作为太阳系唯一已知的宜居星球,得益于地球磁场的庇护[1]。然而,地球磁场的产生 机制却尚未明确(Science:世界最前沿125个科学问题之一)[2]。目前,主流的地核发电机理论认为: 地磁场是由液态外核 Fe 合金对流,通过电磁感应的方式产生并运作,而地核发电机的运作功率则是由 外核温压下液态 Fe 合金的热导率所决定[3]。因此,测量高温高压下 Fe 的热导率,对于探究地球磁场 的能量来源、地核热演化等关键科学问题至关重要。



图1 高压变温热导率测量原理示意图及应用领域

关键词: 高压; 热导率; 金刚石对顶砧

参考文献

- 1. 徐义刚 et al. 地球宜居性的深部驱动机制. 科学通报 69, 169-183 (2024).
- 2. Landeau, M. et al. Sustaining Earth's magnetic dynamo. Nat. Rev. Earth Environ. 3, 255–269 (2022).
- 3. Dobson, D. Earth's core problem. Nature 534, 45–45 (2016).

High-Pressure Tuning of Electrical Transport in Freestanding

Oxide Films

Jingxin Chen^{1,2},[†], <u>Xiang Huang</u>^{1,2},[†], Zhihan Qiao^{1,2}, Jiao Li^{1,2}, Jiahao Xu^{1,2},

Haiyang Zhang^{1,2}, Deyang Li^{1,2}, Enyang Men^{1,2}, Hangtian Wang^{1,2}, Han Zhang^{1,3},

Jianyu Xie⁴, Guolin Zheng¹, Mingliang Tian^{1,*}, Qun Niu^{1,*}, Lin Hao^{1,*}

¹Anhui Provincial Key Laboratory of Low-Energy Quantum Materials and Devices, High Magnetic Field Laboratory, HFIPS, Chinese Academy of Sciences; Hefei, Anhui, 230031, China.

² Science Island Branch of Graduate School, University of Science and Technology of China; Hefei, 230026, China.

³ School of Microelectronics and Control Engineering, Changzhou University; Changzhou, Jiangsu, 213001, China.

⁴ Spin-X Institute, School of Chemistry and Chemical Engineering, South China University of Technology; Guangdong, 511442, China.

*Corresponding author. Email: tianml@hmfl.ac.cn, qniu@hmfl.ac.cn, haolin@hmfl.ac.cn.

摘要: freestanding oxide films of oxide films under high pressure is largely unexplored due to the absence of a universal strategy. In this work, we have developed an in-house route to investigate the electrical transport properties of oxide films under high pressures, by improving the elasticity of freestanding oxide films and the robustness of high-pressure techniques on nano-devices. As a showcase, we investigated the electrical resistivity of perovskite SrIrO₃ films under high pressures, and found a pressure-driven semimetal-to-insulator transition and an insulator-to-metal transition. At the monolayer-limit, the SrIrO₃ films directly transform from an insulating state to a metallic state, highlighting the intriguing interplay of dimensionality and hydrostatic pressure in correlated oxides, which can be unveiled through the universal high-pressure strategy.

关键词: high pressure, freestanding oxide films, electrical transport. perovskite SrIrO3

参考文献:

- 1. Ahn, C. H., Rabe, K. M. & Triscone, J. M. Ferroelectricity at the nanoscale: Local polarization in oxide thin films and heterostructures. *Science* **303**, 488-491 (2004).
- 2. Hwang, H. Y. et al. Emergent phenomena at oxide interfaces. Nat. Mater. 11, 103-113 (2012).
- 3. Zubko, P., Gariglio, S., Gabay, M., Ghosez, P. & Triscone, J.-M. Interface Physics in Complex Oxide Heterostructures. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 2, 141-165 (2011).
- Dawber, M., Rabe, K. M. & Scott, J. F. Physics of thin-film ferroelectric oxides. *Rev. Mod. Phys.* 77, 1083-1130 (2005).

专题代号: E

用于大容量压机超高温高压实验的虚拟温度计

<u>丰丙涛</u>¹、谢龙剑^{2,3}、侯旭远¹、刘书成¹、陈陆瑶¹、赵鑫宇¹、李晨一¹、周强¹、胡阔¹、刘兆东^{1,4}、刘冰冰¹

¹吉林大学物理学院 超硬材料国家重点实验室 综合极端条件用户实验装置(吉林 长春 130012);

²伦敦大学学院地球科学系(英国 伦敦 WC1E 6BS);

3卡内基科学研究所地球与行星实验室 (美国 华盛顿哥伦比亚特区 20015);

4吉林大学地球科学学院(吉林 长春 130012)

Email: fengbt22@mails.jlu.edu.cn; longjian.xie@ucl.ac.uk; liu_zhaodong@jlu.edu.cn

摘要:

超高温高压实验对于研究材料在极端条件下的物性行为至关重要。然而,2600 K 以上的温度测量 由于缺乏可靠的热电偶材料而面临挑战。本文构建了一种基于三维有限元建模的"虚拟温度计"方法, 用于估算大腔体压机实验中超高温环境下的温度分布¹。模型综合考虑交流与直流加热模式、实际装置 结构、以及电极、热电偶、压砧和传压介质的热效应。该方法在 2600 K 以下与实验温度 - 功率关系高 度吻合,并可在更高温条件下保持低于 80 K 的预测精度。结果显示,所使用的硼掺杂金刚石加热器在 径向与轴向方向均表现出良好的温度均匀性。该研究为极端条件实验提供了稳定可靠的温度测量替代手 段,有望推动地球科学和材料科学研究的深入发展。

参考文献

 Feng B., Xie L., Hou X., et al. A virtual thermometer for ultrahigh-temperature-pressure experiments in a large-volume press. Matter Radiat. Extremes 9, 047401 (2024); doi: 10.1063/5.0184031

329

应用于六面顶压机的快速冷却合成块组装设计

吴培衍、徐永江、林彦蒿

北京高压科学研究中心 Email: peiyan.wu@hpstar.ac.cn

摘要:

六面顶压机广泛应用于高压材料科学和地球与行星科学研究领域。相比于 6-8 多面顶压机,六面顶 压机所使用的合成块更加容易加工和装配,快速的升压和降压速率可以大大缩短实验周期。北京高压科 学研究中心的六面顶压机能够在合成块中心产生高达 8 GPa 的压强和超过 2000 °C 的高温。然而,优先 考虑保温效果的常规合成块组装限制了实验淬火时的冷却速率,高温下熔融的硅酸盐样品在淬火冷却过 程中形成的淬火结构已经不能保存其高温熔融时的信息。在高温高压实验中如何合成结构均匀的玻璃是 一个有挑战性的技术问题,提升高温下从熔体降温到玻璃的冷却速率是尽可能保存熔体原始信息的关 键。我们对传统合成块组装进行了创新改进,去除氧化镁衬管,将样品仓直接嵌入石墨棒加热体形成一 体化结构,再整体置于氧化镁衬管内。这种新型组装不仅提升了保温性能和加热效率,更实现了接近 10 倍提升的淬火冷却速率。对比实验结果显示,传统组装样品呈现明显的条带状矿物,即淬火结构, 而快速冷却样品则保持均匀玻璃结构,电子探针成分分析进一步证实了这一差异。该技术改进有助于对 地球与行星科学相关的硅酸盐熔体性质的理解,进而推广到其他难以淬火到均匀玻璃的熔体,在对研究 挥发性元素(例如氢、碳和硫等)在矿物和硅酸盐熔体之间的分配规律和对行星岩浆性质的影响等领域 有着广阔的应

关键词: 快速冷却, 六面顶, 高温高压, 硅酸盐玻璃

参考文献

Wu, P., Xu, Y., Lin, Y. A novel rapid cooling assembly design in a high-pressure cubic press apparatus. Matter and Radiation at Extremes, 9, 027402 (2024). https://doi.org/10.1063/5.0176025

330

高压下范德华半导体ZnPSe₃的带隙工程和振动特性

苏柔琼,"袁亦方,"*郭海中", b*

a 郑州大学物理学院, 郑州 450001

b 河南省科学院量子材料与物理研究所, 郑州 450046

Email: yfyuan@ zzu.edu.cn; hguo@zzu.edu.cn.

摘要:近年来,在二维范德华材料领域,过渡金属磷硫族化合物(MPX₃,M=过渡金属, X=S,Se)因其独特的层状结构和多样的物理性质备受关注。在这项工作中,我们利用拉曼 光谱和高压紫外-可见吸收光谱技术,系统研究了ZnPSe₃在极端条件下的振动模式和电子结 构演化。实验结果表明,ZnPSe₃在 5-300 K 和 0-22.1 GPa 的环境下振动模式保持稳定。此外, ZnPSe₃的带隙在 0 GPa-20.6 GPa 压力范围内呈现出先增后减的趋势,这可能与材料在压力 下从间接带隙向直接带隙的转变有关。这项工作不仅丰富了范德华材料的研究,还为其在能 带工程中的应用提供了重要的实验依据。



图 1

关键词: 高压; 带隙工程; 拉曼光谱; $ZnPSe_3$ 参考文献:

[1] Qin X X, Zhang H W, Chen L, Chu Y, Zhang G Z, Wang Q L, Wang L R, Li Q, Li Y W, Guo H Z and Liu C L

2024 Appl. Phys. Lett. 124 073903

[2] Yan Y, Yang J H, Du J, Zhang X M, Liu Y Y, Xia C X and Wei Z M 2021 Adv. Mater. 33 2008761

[3] Grzeszczyk M, Novoselov K S and Koperski M 2022 Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 119 e2207074119

6-8 型静高压装置末级压砧的几何结构探索

孙叶武1、贺端威1,2*

四川大学原子与分子物理研究所
四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室
*E-mail: <u>duanweihe@scu.edu.cn</u>

摘要:

现目前国产大腔体静高压装置,可实现为厘米级样品腔提供 15 GPa 左右的压力。但由 于受到压腔组装的限制,普通碳化钨(WC)末级压砧以常规方式在大腔体压机中所产生的压 力难以进一步提升。本工作基于国产 6×800 t 铰链式六面顶压机的二级 6-8 型静高压装置, 对其末级压砧的几何结构进行了优化探索。结果表明:(1)使用拥有负角度的末级压砧,可 以在保持腔体体积的基础上,将传压效率提升 10%~20%。(2)负角度末级压砧的传压效率 随着压机加载的提升而提升,最高可达 20%以上。

关键词: 大腔体静高压装置;压力标定;二级增压装置;六面顶压机

参考文献:

- 1. 何飞, 贺端威, 马迎功, 等. 二级 6-8 型静高压装置厘米级腔体的设计原理与实验研究[J]. 高压物理学 报, 2015, 29(3): 161-168.
- Kunimoto T, Irifune T, Tange Y, et al. Pressure generation to 50 GPa in Kawai-type multianvil apparatus using newly developed tungsten carbide anvils[J]. High Pressure Research, 2016, 36(2): 97-104.

一种基于二极管 I-V 特性的压力标定技术及其应用

王扬斌、吴彬彬、陶雨、刘德璞、雷力*

四川大学 原子与分子物理研究所

Email: lei@scu.edu.cn

摘要:

随着大腔体压机 (LVP)的压力极限越来越高,而目前大腔体压机原位压力标定技术在 应用中普遍面临成本高、操作复杂或难以实时原位监测等问题^{1,2}。近期,我们提出了一种 基于二极管电流-电压 (*I-V*)特性的新型压力标定技术³,该技术通过分析二极管在高压下 *I-V*特性的规律性偏移,构建压力与二极管正向电压之间的定量映射关系,通过电学信号直 接反馈压力信息⁴,验证了二极管作为压力传感器的可行性。通过对比温度(*T*)和压力(*P*) 对 PN 结势垒高度的影响,我们提出了一个广义肖克利方程同时描述*T*和*P*对二极管*I-V*特 性的影响。此外,我们设计了一款恒流驱动的二极管压力测量装置并应用在大腔体压机中, 成功实现了室温条件下 0~6 GPa 范围内的压力测量,实验所用二极管的压力灵敏度为-56(4) mV/GPa。该技术不仅具有低成本、可实时原位监测、可集成度高的特点,同时为高压原位 压力测量技术提供了一种新方法,该方法己申请国家专利⁵。



图 1 温度和压力对二极管电流-电压特性的影响

关键词:压力标定;二极管 *I-V* 特性;大腔体压机;高压原位测量 参考文献

- 1. X. Yan, X. Ren and D. He, Rev. Sci. Instrum. 2016, 87:125006.
- 2. J. Akella and G. C. Kennedy, J. Geophys. Res. 1971, 76: 4969-4977.
- 3. Y. Wang, L. Lei*, et al, (In preparation).
- 4. A. Jayaraman, M. E. Sikorski, et al., J. Appl. Phys. 1967, 38: 4454-4459.
- 5. 雷力,王扬斌. 一种大腔体压机原位压力标定方法。发明专利/实用新型 (CN2025206281676).

专题代号: E

北京高压科学研究中心大腔体压机的压力标定

<u>徐永江</u>、吴培衍¹、尚升¹、王雪¹、程行¹、吕世杰^{1,2}、冯嘉嘉¹、赵磊¹、 雷尚¹、高书畅¹、许潜智¹、Wim van Westrenen¹、石井 貴之^{1,3}、桂 智男¹、

陶仁彪1、苏磊1、陈斌1、丁阳1、杨文革1、毛河光1、林彦蒿1

1 北京高压科学研究中心 2 上海前瞻物质科学研究院 3 冈山大学行星物质研究所 Email: yanhao.lin@hpstar.ac.cn

摘要:

在高压物理、化学、材料科学地球与行星科学等多个研究领域,大腔体压机(Large Volume Press, LVP)被广泛用于研究材料在极端高压高温条件下的物理和化学性质。实现这些研究目标的前提是能够 对实验条件中的压力进行准确识别和控制。然而,关于 LVP 的压力标定,公开可查的原始标定资料相 对匮乏,制约了该类设备在超高压研究中的广泛应用。本研究系统地对北京高压科学研究中心 (HPSTAR)配置的多种大腔体压机进行了压力标定工作,我们采用标准相变标记物,涵盖了多种金属 导体、半导体和矿物,通过原位和非原位的测量和识别手段,构建了各类设备在不同设备与加载条件下 的压力标定曲线,涵盖了活塞圆筒式压机、铰链式六面顶压机以及多面顶大压机等典型机型,压力标定 范围分别为:活塞圆筒压机(0.5-3.2 GPa),铰链式六面顶压机(2.55-7.6GPa),多面顶大压机(2.55 - 34.5GPa)。研究不仅为 HPSTAR 内部的高压实验提供了统一且可追溯的压力参照,也为其他使用相似 大腔体装置开展超高压实验的研究者提供参考标准与技术建议,有助于推动 LVP 技术在更高压力范围 的应用。

关键词: 大腔体压机 (LVP); 压力标定; 北京高压科学研究中心

334

适配 MPMS 磁测量的 10 GPa 金刚石对顶砧高压装置

<u>于瀚林</u>¹ Nikita Liedienov^{1,2} 李全军¹ Georgiy Levchenko^{1,2}

1吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室

²Donetsk Institute for Physics and Engineering named after O.O. Galkin, Kyiv, Ukraine.

Email: yuhl20@ mails.jlu.edu.cn

极端条件(高压、低温、强磁场)下材料的新奇量子态与相变行为是凝聚态物理与材料科学交叉领 域的前沿热点^[1]。高压磁性测量技术通过耦合静水压加载与高精度磁学表征,为揭示电子关联体系中的 磁有序调控、量子临界涨落及拓扑磁响应提供了重要实验手段^[2]。本研究针对商用磁性测量系统 MPMS 在高压极限、磁底噪抑制及微型腔体操作性方面的技术限制,成功开发了一款适配 MPMS 平台的金刚 石对顶砧高压装置,其最大压强输出达 10 GPa 级。核心技术创新包括:1.低磁噪一体化结构:采用非 磁性 NiCrAl 合金(屈服强度≥1.2 GPa)整体加工成准圆柱对称腔体,成功抑制磁底噪至~1×10⁻⁶ emu/Gs, 较传统 BeCu 基装置降低两个数量级;2.间接梯度加压机制:通过分体式活塞-圆筒构造,利用螺纹自 锁施压驱动金刚石轴向位移,在微型化腔体(~5.2 mm)内实现压力均匀加载;3.多物理场原位标定: 结合低温超导探针 Pb 与红宝石 R1 荧光峰压力传感机制,验证了装置在变温条件下的压强稳定性。本 工作突破了磁探测微型化高压装置的压强限制,为拓扑磁序、压力诱导超导等前沿方向的极端条件研究 提供了高兼容性实验平台,同时为多场耦合精密测量仪器的设计范式革新提供了参考价值。



图 1 高压装置结构图及室温与低温下的压强误差

关键词: 高压; 磁化表征; 金刚石对顶砧 参考文献

[1] Kong P, Minkov V S, Kuzovnikov M A, et al. "Superconductivity up to 243 K in the yttrium-hydrogen system under high pressure". Nature Communications, 2021, 12(1): 5075.

[2] Banerjee H, Rittsteuer A, Aichhorn M. "Temperature and pressure driven spin transitions and piezochromism in a Mn-based hybrid perovskite". Physical Review Materials, 2022, 6(4): 044401.

Introduction to the high-pressure program at SIRIUS, Brazil

Danusa do Carmo

Brazilian Center for Research in Energy and Materials

Email: danusa.carmo@lnls.br

摘要:

Small focused X-ray beams are vital for high-pressure X-ray techniques. Therefore, research on extreme conditions, such as pressure, benefits enormously from the construction of fourth-generation synchrotron rings. In Brazil the new synchrotron light source - Sirius, which provides highly brilliant X-ray beams, enables to study samples under extreme conditions by means of a multitude of X-ray techniques. Support laboratories for sample preparation and development of instrumentation were also implemented to support the experiments at the beamlines. This talk will provide an overview of the current high-pressure capabilities at Sirius and how it can be accessed by users to outstanding problems in high pressure science.

关键词: High Pressure, Synchrotron Source, XRD, Phase Transitions, Low Temperature

极端条件下行星内部氢、氦与"冰"复合体系的相变研究

李相东、张康弛、叶春晖、孙晓宇、王中平、代如成、张增明*

中国科学技术大学物理学院

*Email: zzm@ustc.edu.cn

摘要:

低温可凝聚气体(H₂、He)与"冰"(N₂、H₂O、CH₄、NH₃、H₂S 以及 PH₃等)是富氮冰卫星和行 星(土卫六、海卫一和冥王星)、气态巨行星(木星、土星)以及冰巨星(天王星、海王星)大气以及 内部结构的主要组成成分。研究上述简单分子的二元或者三元体系在极端条件下的相变规律,将会对我 们推测富氮冰卫星及冰巨星的内部组分及结构演化提供支持。基于金刚石对顶砧装置结合低温液氦系统 以及激光加热系统,利用显微光学成像、拉曼光谱、同步辐射红外光谱、X 射线衍射,紫外-可见吸收 光谱、高压电输运测量等手段研究了可凝聚气体与"冰"的He-N₂、He-CH₄、H₂S-PH₃-H₂在极端条件 下的相变以及化学反应规律^{1,2},确定了He-N₂、He-CH₄体系在高压下的相浓度演化以及压强浓度相图; 成功合成了一些列H₂S-PH₃-H₂三元氢化物,确定了其在高压下的脱氢聚合以及金属化。

关键词: 高压 氢 氦 "冰" 高温高压 光化学 结构相变 压致化学反应

参考文献

1. Xiangdong Li, Hao Su, Wentao Liang, Wenju Zhou, Azizur Rahman, Zilong Xu, Cheng Zhong, Di Mai, Rucheng Dai, Huiyang Gou, Zhongping Wang, Xianxu Zheng, Qiang Wu, and Zengming Zhang. Inference of a Hot Ice Layer in Nitrogen-Rich Planets: Demixing the Phase Diagram and Phase Composition for Variable Concentration Helium–Nitrogen Mixtures Based on Isothermal Compression. *Journal of Physical Chemistry A* 2022, 126: 3745-3757.

2. Xiangdong Li, Kangchi Zhang, Wentao Liang, Cheng Zhong, Di Mai, Azizur Rahman, Xiaoyu Sun, Rucheng Dai, Zhongping Wang, Qiang Wu, and Zengming Zhang. Pressure-induced Multistep Dehydrogenated Polymerization and Metallization of H₂S-PH₃-H₂ Compound: Properties Measurement up to Megabar Pressures. *Chemistry of Materials* 2024, 36: 911-924.

氟代芳香烃的高压聚合反应与机理

<u>郑海燕</u>、车光玮、李阔

北京高压科学研究中心 Email: zhenghy@hpstar.ac.cn

摘要:金刚石纳米线是由 sp3 碳原子组成的直径只有几个原子宽度的一维纳米线材料,它可以看作是完 全氢化的碳纳米管^[1-2]。早在 2001,理论科学家提出了金刚石纳米线的结构模型,直到 2015 年才在实 验上合成出来。T.C.Fitzgibbons 等人通过控制缓慢的升降压速率,利用苯的压力诱导聚合首次成功合 成了金刚石纳米线。理论计算显示该材料具有跟碳纳米管相比拟的强度,同时又具有聚合物的柔性,是 一类刚柔并济的材料,但是它的发展却长期受限于合成,得到的材料是多种产物的混合物,难以得到具 有单一结构的纳米线材料。氟原子由于其具有高的电负性,可以改变芳香分子的偶极以及碳原子的反应 活性^[3],因此我们系统研究了具有不同氟原子取代的芳香烃在高压下的聚合反应过程与机制,通过调控 氟原子取代的位置,获得了[4+2]环加成反应,以及自由基聚合等不同类别的反应过程,得到了具有不 同结构的金刚石纳米线。该系列工作为理解认识芳香分子的聚合过程提供了重要的理论参考。



图 1 高压下 1,2,3-三氟苯通过[4+2]反应路径形成[(356, 124)-(352, 614)]n 金刚石纳米线的过程示意图,

其中新生成的化学键以橙色标注。

关键词: 金刚石纳米线, 高压化学, 氟原子取代, 聚合过程, 反应机制 参考文献

- Wang, X.; Yang, X.; Wang, Y.; Tang, X.; Zheng, H.; Zhang, P.; Gao, D.; Che, G.; Wang, Z.; Guan, A.; Xiang, J.-F.; Tang, M.; Dong, X.; Li, K.; Mao, H.-k. From Biomass to Functional Crystalline Diamond Nanothread: Pressure-Induced Polymerization of 2,5-Furandicarboxylic Acid. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144: 21837.
- 2. Gao, D.; Tang, X.; Xu, J.; Yang, X.; Zhang, P.; Che, G.; Wang, Y.; Chen, Y.; Gao, X.; Dong, X.; Zheng, H.; Li, K.; Mao, H.-k. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (PNAS), 2022, 119: e2201165119.
- Wang, Y.; Dong, X.; Tang, X.; Zheng, H.; Li, K.; Lin, X.; Fang, L.; Sun, G.; Chen, X.; Xie, L.; Bull, C. L.; Funnell, N. P.; Hattori, T.; Sano-Furukawa, A.; Chen, J.; Hensley, D. K.; Cody, G. D.; Ren, Y.; Lee, H. H.; Mao, H.-k.; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58: 1468.

压强诱导 MOFs 材料白光研究

杨新一

吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室,综合极端条件高压科学中心,长春, 130012

Email: yangxinyi@jlu.edu.cn

摘要:

基于可设计的拓扑结构,金属有机框架(MOFs)材料能够将多个发射中心组合到单一框架上,在 开发单相白光材料上具有独特的优势。目前通过封装多色客体分子或混合多种稀土离子制备白光 MOFs 的工艺已经比较成熟,但开发高质量的非掺杂白光 MOFs 仍然具有挑战性。压强作为调控晶体结构和 电子结构的有效手段,已经被证实可以用于诱导材料产生优异的光学性质。基于此,我们提出利用压强 处理工程定向调控 Zn-IPA 结构刚性和配位构型,成功在环境条件下提高其系间窜越效率,实现高效荧 光/磷光混合型白光发射,荧光量子产率(PLQY)从初始的 20.9%显著提高至 81.3%。进一步又通过高 压手段调控 Cd(BDC)(DMF) MOF 中配体的空间构型,实现了配体到配体电荷转移及自旋轨道耦合电荷 转移系间窜越的动态调控,成功在环境条件下构建了荧光-磷光占比可调的蓝-绿-白多色发光 MOFs 体 系。此外,我们利用压强处理工程调控非掺杂[Zn(Tdc)(py)]n MOFs 纳米晶的双荧光态,在环境条件下 实现了材料高效白光发射。在此基础上,通过压强处理工程调控 TMOF-8(Cl)材料的结构畸变程度,首 次在 MOFs 材料中实现了压强诱导的自陷态激子发射增强,并在压强处理后获得了可控多色发光和高 质量的白光发射。值得注意的是,我们也可以利用压强处理工程和氢键协同效应,在不含重原子的有机 小分子间苯二甲酸(IPA)材料中点亮三重态激子,提高磷光效率和寿命,实现高效荧光/磷光混合型白 光发射,光致发光量子产率从19%显著提高到 75%。这些工作为设计和制备高性能的白光 MOFs 提供 了全新的策略。



图 1 Cd(BDC)(DMF), [Zn(Tdc)(py)]n, TMOF-8(Cl)和 IPA 在环境条件下和压强处理后的发光性能。 关键词:压强诱导发光;金属有机框架;压强处理工程;氢键协同效应

参考文献

- 1. Yang, Q.; Wang, W.; Yang, Y.; Li, P.; Yang, X.; Bai, F.; Zou, B. Nat. Commun. 2025, 16: 696.
- 2. Zhang, T.; Yin, Y.; Yang, X.; Li, N.; Wang, W.; Yang, Y.; Tian, W.; Bai, F.; Zou, B. Nat. Commun. 2025.
- 3. Yang, Y.; Wang, Y.; Bai, F.; Li, S.; Yang, Q.; Wang, W.; Yang, X.; Zou, B. Nano Lett. 2024, 24, 9898–9905.
- 4. Yang, Y.; Zhao, X.; Liang, J.; Yang, Q.; Zhang, T.; Wang, Y.; Yang, X.; Zou, B. Laser Photonics Rev. 2025, 2401961.
- Yang, Q.; Yang, X.; Wang, Y.; Fei, Y.; Li, F.; Zheng, H.; Li, K.; Han, Y.; Hattori, T.; Zhu, P.; Zhao, S.; Fang, L.; Hou, X.; Liu, Z.; Yang, B.; Zou, B. Nat. Commun. 2024, 15: 7778.

金属卤化物压强诱导发光与压致变色调控

<u>肖冠军*</u>、邹勃*

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室 Email: xguanjun@jlu.edu.cn; zoubo@jlu.edu.cn

摘要:高压(强)作为独立于温度和组分的热力学参量,可以显著减小原子间距,改变原子成键和堆积 方式以及电子结构,诱导结构相变形成全新的高压相,而这些高压相多具有异于常态的奇异特性。我们 利用金刚石对顶砧进行精细的压力控制,对系列不同维度的卤素钙钛矿材料进行了系统的研究,全面给 出了高压下卤素钙钛矿带隙调控的清晰物理过程,成功实现了Cs4PbBr6纳米晶的发光从"0"到"1" 的突破,创新性提出了"压强诱导发光"(Pressure-Induced Emission: PIE)概念。在此研究基础之上, 我们也发展了高压作为解决常压下部分科学争议的有效工具。针对Cs4PbBr6零维卤素钙钛矿纳米晶发 光的争论,通过引入压力维度,探讨了发光的Cs4PbBr6纳米晶在高压下的光物理行为,为常压下Cs4PbBr6 纳米晶发光起源的科学争论提供了新的证;此外,我们进一步提出通过构建空间位阻提高相变势全,实 现了高效率发光高压相的截获。



图 1 压强诱导发光 Pressure-Induced Emission: PIE

关键词:压强导发光;带隙调制;结构调控;高压相截获;解决常压科学争议参考文献

(1) Z. Ma, Z. Liu, S. Lu, L. Wang, X. Feng, D. Yang, K. Wang, G. Xiao, L. Zhang, S. A. T. Redfern, B. Zou, Nat. Commun. 2018, 9, 4506.

(2) Y. Shi, Z. Ma, D. Zhao, Y. Chen, Y. Cao, K. Wang, G. Xiao, B. Zou, J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 6504.

(3) Z. Ma, Q. Li, J. Luo, S. Li, L. Sui, D. Zhao, K. Yuan, G. Xiao, J. Tang, Z. Quan, B. Zou, J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 15176.

(4) Z. Ma, S. Yang, Y. Shi, Y. Fu, K. Wang, G. Xiao, B. Zou, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202406015.

(5) X. Yu, Y. Fang, X. Sun, Y. Xie, C. Liu, K. Wang, G. Xiao, B. Zou, Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63, e202412756.

无机功能材料中孤对电子的压力调控与物性研究

卜克军、吕旭杰

北京高压科学研究中心 Email: kejun.bu@hpstar.ac.cn

摘要:

孤对电子(Lone Pair Electrons, LPEs)在无机功能材料中扮演着关键角色。具有 ns² 孤对电子的晶体结构通常会导致非简谐的晶格振动和强的畸变极化,赋予了材料优异的热电、光电、铁电和二次谐波响应等功能特性。调控孤对电子的立体化学活性,是优化材料功能性质的重要途径。本报告聚焦无机功能材料孤对电子表达的压力调控,系统阐述其立体化学活性在压力作用下的演化机制及其对材料物性的影响。具体包含以下两方面进展:

- 通过压力调控层状 Bi₂O₂S 中 Bi³⁺孤对电子立体化学活性,揭示了孤对电子演化对晶体结构和光电性质的影响机制^[1]。结果表明,压力下 Bi³⁺孤对电子经历动态偏心归正、表达受抑制及最终消失的演化过程(图 1a)。压力诱导的阳离子中心化显著提升了材料光电性能,使 Bi₂O₂S 的光电流增强近三个数量级。
- 2. 利用压力连续调控无机分子晶体 SbI₃·3S₈中的孤对电子表达,实现了结构极化的精确控制,并显著增强了该分子晶体的二次谐波响应^[2]。本工作引入 I-Sb-I 角度(ā)来量化压力下孤对电子的表达程度,并建立了ā与偶极矩之间的定量构效关系。结果显示,ā减小使得孤对电子的表达更加局域化,进而排斥成键电子对,增强分子极化程度,并提升材料的非线性光学性能(图1b)。进一步将这一定量构效关系应用于多个无机分子晶体中,证实了孤对电子表达在调控分子晶体结构极化和非线性光学性能方面的普适性。



图 1. 孤对电子表达的连续调控和极化工程示意图

关键词: 孤对电子, 压力, 立体化学活性, 晶体结构演化, 物理性质 参考文献

- 1. Kejun Bu, et al. J. Phys. Chem. Lett., 2020, 11, 9702–9707.
- 2. Kejun Bu, et al. J. Am. Chem. Soc., 2024, 146, 22469-22475.

金纳米团簇中压致近红外发光增强研究

陈高松*、杨雅妮、臧双全*

郑州大学化学学院 Email: chengaosong@zzu.edu.cn

摘要:

阐明原子结构精确的金纳米团簇(Au NCs)中近红外(NIR)光致发光量子产率(PLQY)低的根源,对于开发高性能光学器件至关重要。然而,受限于复杂的非辐射过程,Au NCs低 NIR-PLQY 的原因仍然模糊不清。基于此,我们选取[Au₁₁(PPh₃)₈Cl₂]Cl(Au₁₁-1)和 Au₁₁(PPh₃)₇Cl₃(Au₁₁-2)为研究对象,通过静水压效应探究 Au NCs中低发光效率的内在机制¹⁴。在压缩下,Au₁₁-1表现出显著的压致NIR发光增强。在 3.6 GPa 时,Au₁₁-1晶体呈现出一个破纪录的NIR-PLQY(75.6%)。然而,在Au₁₁-2中未观察到明显的压致NIR发光增强现象。原位高压结构表征和理论计算表明,Au₁₁-1和 Au₁₁-2中显著的各向异性压缩导致金核结构发生了差异化的结构畸变。具体的,沿晶轴 *a* 方向较快的收缩加剧了Au₁₁-1核心的结构畸变,而沿晶轴 *b* 方向更快压缩则抑制了Au₁₁-2核心的结构畸变。高压瞬态吸收光谱、时间分辨光致发光光谱和拉曼光谱协同表明,压力显著削弱了Au₁₁-1内核低频振动引起的非辐射损失,成功点亮了Au₁₁-1的高效近红外发光。该工作从原子水平上揭示了Au NCs中压致 NIR发光增强的内在结构机制,有望为高性能 NIR发光材料的设计、开发提供实验借鉴和理论依据。



图 1. 金纳米团簇中压致近红外发光增强研究

关键词: 金纳米团簇,近红外发光,静水压,压致发光增强 参考文献:

- Ru, H.-Y.; Yang J.-K.; Yang, Y.-N.; Wan, Q.-Y.; Zhu, M.-J.; Hu J.-H.; Li J.; Li Q.; Zhou M.; Li G.; Chen, G.; Wang, Y.; Jiang, L.; Wu, Y.; Zang, S.-Q., *Sci. Adv.* 2025, DOI: 10.1126/sciadv.adv0298.
- Sun, M.-E.; Wang, F.; He, M.; Yang, Y.-N.; Yang, J.-K.; Zhu, M.-J.; Wan, Q.-Y.; Chen, G.; Wang, Y.; Fu, Y.; Li, Q.; Wang, Z.; Jiang, L.; Wu, Y.; Zang, S.-Q., *J. Am. Chem. Soc.* 2025, *147*, 10706–10714.
- Zhang, X. J.; Sun, M. E.; Sun, F.; Jin, Y.; Dong, X. Y.; Li, S.; Li, H. Y.; Chen, G.; Fu, Y.; Wang, Y.; Tang, Q.; Wu, Y.; Jiang, L.; Zang, S.-Q., Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202401724.
- Sun, M.-E.; Wang, Y.; Wang, F.; Feng, J.; Wang, L.; Gao, H.; Chen, G.; Gu, J.; Fu, Y.; Bu, K.; Fu, T.; Li, J.; Lü, X.; Jiang, L.; Wu, Y.; Zang, S.-Q., *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 8908–8916.

专题代号: F

新型电子化合物的理论预测及其电子特性

李延龄

江苏师范大学物电学院,221116,江苏徐州 Email: ylli@jsnu.edu.cn

摘要: 近十年来, 电子化合物作为新型非常规离子固体, 在凝聚态物理及交叉学科等领域引发广泛关注。 本报告将介绍我们近期在新型电子化合物筛选方面的研究进展: 1)在确定 Ca-C 热动力学相图的基础 上,发现 Ca₅C₂和 Ca₂C 为电子化合物,其中 Ca₂C 已被实验合成; 2)超导的准一维电子化合物 Ca₃Si; 3)在确定 Li-Cs 体系热动力学相图的基础上,发现 Li-Cs 化合物在高压下表现出 Li→Cs 的电荷转移, Cs 的 Bader 电荷甚至超过-3,富 Li 化合物呈现出超导特性; 4)筛选出了 X-type 电子化合物 M₂N(M=Ti、 Zr、Ha),并发现通过空穴掺杂可有效调控其超导电性; 5)报道了磁性电子化合物 LaBrI。



图 1 (a) Ca₅C₂的 ELF; (b) Ca₂C 的 ELF; (c) Ca₃Si 的超导电性; (d) X-type exectride Ti₂N.

关键词:电子化合物,高压,超导,第一性原理计算参考文献

- 1. Zha, *et al*. X-type electrides hosting skin-like interstitial electron states and doping-enhanced superconductivity. **arXiv**: 2504. 19263.
- 2. Huang, et al. Novel topological motifs and superconductivity in Li-Cs system. Nano Letters 23, 5012-5018(2023).
- 3. Zha, *et al.* Refined phase diagram and kagome-lattice superconductivity in Mg-Si system. **Phys. Rev. Mater.** 7, 114805 (2023).
- 4. Jiang, et al. Prediction of the two-dimensional Janus ferrovalley material LaBrI. Phys. Rev. B 104, 035430 (2021).
- 5. Sa, *et al.* Electronic anisotropy and superconductivity in one-dimensional electride Ca₃Si. J. Phys. Chem. C 124, 7683 (2020).
- 6. Li, et al. Investigation of exotic stable calcium carbides using theory and experiment. Nat. Commun. 6, 6974 (2015).

专题代号:F

新型杂化金属卤化物发光材料

权泽卫*

南方科技大学 理学院化学系, 深圳, 518055 *Email: <u>guanzw@sustech.edu.cn</u>

摘要:杂化金属卤化物是一类由有机阳离子和无机金属卤素多面体阴离子组成的新型发光材 料。其中,有机单元具有丰富的种类和功能性,无机单元具有良好的结构、光学可调性。两 种组成单元的多样性使得杂化金属卤化物可作为一个优良的模型体系,能够在分子层面上将 有机和无机单元的优势结合,从而构建各种各样的光功能材料。本报告将从材料的组成和结 构设计出发,聚焦于发光杂化金属卤化物中有机单元的功能性和压力调节无机单元的激子发 光。将介绍各个组成单元的发光行为和性能优化,如余辉、圆偏振发光等,从而揭示有机和 无机相互作用形式,构筑金属卤化物材料结构与发光的内在关系。

关键词: 杂化金属卤化物, 发光材料, 高压, 圆偏振光 参考文献:

- Q. Li, Z. Chen, B. Yang, L. Tan, B. Xu, J. Han, Y. Zhao, J. Tang, Z. Quan,* J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 1786-1791.
- [2] Z. Luo, Y. Liu, Y. Liu, C. Li, Y. Li, Q. Li, Y. Wei, L. Zhang, B. Xu, X. Chang, Z. Quan,* Adv. Mater. 2022, 34, 2200607.
- [3] Y. Wei, C. Li, Y. Li, Z. Luo, X. Wu, Y. Liu, L. Zhang, X. He, W. Wang, Z. Quan,* Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202212685.
- [4] Y. Liu, Z. Luo, Y. Wei, C. Li, Y. Chen, X. He, X. Chang, Z. Quan,* Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202306821.
- [5] Q. Li, B. Xu, Z. Quan,* Acc. Chem. Res. 2023, 56, 3282-3291.
- [6] J. Han, Y. Li, P. Shen, Q. Li, Y. Liu, Y. Wei, P. Zhang, Z. Quan,* Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202316348.

压力响应型光功能材料的探索与机理研究

<u>王凯</u>

聊城大学物理科学与信息工程学院,山东省极端条件量子材料重点实验室 Email: kaiwang@lcu.edu.cn

摘要:作为一种常见的外界刺激与热力学参量,压力可以在分子尺度上调控材料的微观结构、电子状态 和分子间相互作用,有效地改变材料物理化学性质使之产生明显的响应信号。因此压力响应材料可以灵 敏地感知外界压力变化并及时做出反馈,在科学研究和工程技术领域中有着重要的应用价值。但随着压 力的增加,高压将会过度压缩材料的体积,破坏材料原有的结构从而使其失去压力响应特性,比如高压 下的非晶化现象、荧光淬灭效应等。因此,如何实现材料在高压下具有良好的压力响应性质,仍存在诸 多挑战与未解难题。我们课题组长期致力于高压下新奇压力响应材料的探索与机理研究,坚持利用静高 压手段调控分子间相互作用与材料精细结构的研究思路,围绕高压下材料的光学响应等核心问题展开研 究,阐明了系列压致荧光增强现象的微观机制,实现了材料发射光谱与吸收光谱的大范围、连续和精准 调制,为新型压力响应材料的设计合成提供了重要思路。



图 1 Pressure-induced piezochromism of BP-o-DMAC crystal.

关键词: 高压; 压力响应; 荧光增强; 压致变色

参考文献

- 1. X. Yang, Y. Dai, H. Liu, et al., J. Am. Chem. Soc., 2025, 147: 5300.
- 2. Z. Li, K. Tong, H. Dong, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64: e202502390.
- 3. L. Guan, Z. Li, K. Wang, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64: e202419867.
- 4. Y. Wang, Z. Xiong, Y. Wang, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64: e202420502.
- 5. X. Yu, Y. Fang, X. Sun, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, 63: e202412756.
- 6. S. Wang, Z. Yang, X. Sun, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63: e202414810.
- 7. Z. Ma, S. Yang, Y. Shi, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63: e202406015.
- 8. D. Cui, F. Bai, L. Zhang, et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 63: e202319815.
- 9. Fang, J., Fu, Z., Chen, X., et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62: e202304234.
- 10. Zhang, L.,Li, S, Sun, H., et al., Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62: e202301573.
调控 Peierls 畸变增强二维范德华层状材料的二次谐波响应

付同欢1、卜克军1、孙旭洲2、黄富强2,*、吕旭杰1,*

¹北京高压科学研究中心 ²中国科学院上海硅酸盐研究所 Email: xujie.lu@hpstar.ac.cn

摘要:

二维范德华层状材料因为具有高的二阶非线性磁化率、结构可调控性以及宽松的相位匹配条件,在 非线性光电子器件领域具有广阔的应用前景。迄今为止,对二维材料非线性光学性能的调控已经取得了 长足的进展。然而,受制于材料体系和实验手段,该领域仍然存在一些关键性问题亟待探索。比如如何 进一步增强二维范德华层状材料的非线性光学效应,尤其是二次谐波效应?结构调控如何影响其二次谐 波响应等。鉴于此,本研究通过引入压力来连续调控 Nb 原子位移,在二维材料 NbOI₂ 中实现了约 3 倍 的二次谐波 (SHG) 增强^[1]。通过引入 Peierls 畸变参数λ,我们建立了λ和 SHG 强度之间的定量关系。 更重要的是,通过阴离子取代的方法,我们可以调节 NbO(I_{1-x}Br_x)₂ (x = 0-1) 中 Peierls 畸变程度,利用 化学掺杂重现了高压下扭曲的结构。其中,λ=0.17 的 NbO(I_{0.60}Br_{0.40})₂展现出比单层 WSe₂高出两个量 级的 SHG 响应。该研究揭示了 Peierls 畸变与 SHG 性质之间的相关性,为通过操控结构畸变设计高性 能非线性光学 (NLO) 材料提供了新的途径。



图 1 物理压力和化学取代对 NbOX₂ (X = I, Br)中 Peierls 畸变和二次谐波产生的相似影响。 关键词:二维材料; 高压; Peierls 畸变; 二次谐波; 化学取代; 构效关系

参考文献

Tonghuan Fu, Kejun Bu, Xuzhou Sun, Dong Wang, Xin Feng, Songhao Guo, Zongdong Sun, Yuqiang Fang, Qingyang Hu, Yang Ding, Tianyou Zhai, Fuqiang Huang, Xujie Lü. Manipulating Peierls distortion in van der Waals NbOX₂ maximizes second-harmonic generation. J. Am. Chem. Soc, 2023, 145(30), 16828.

金刚石纳米线与石墨烷纳米带的高压化学合成

李阔

北京高压科学研究中心 Email: likuo@hpstar.ac.cn

摘要:

碳元素是有机化学和碳材料化学共同的核心元素。借助高压合成手段,将有机化学反应对分子的精准操控能力运用到碳基材料的创制中来,是开发新型碳材料的独特手段。金刚石纳米线和石墨烷纳米带是高压合成得到的两类重要低维碳基材料。金刚石纳米线是 sp3 碳单元之间由多根 o 键相连形成的具有一维结构的材料,具有和碳纳米管类似的力学性质、良好的电绝缘性和各向异性的热导。石墨烷是氢原子饱和的石墨烯,具有打开的带隙。我们通过选择、调控合适的前驱体分子晶体物相,借助高压拓扑化学反应,合成得到了多例原子级精准的金刚石纳米线、石墨烷纳米带,通过多种表征手段确定了其内部结构甚至原子坐标,研究了它们的电化学性质、各向异性的机械性质、和导电、导热性质。这两类材料即将迎来属于它们的新时代。

关键词: 高压; 聚合; 拓扑化学; 金刚石纳米线; 石墨烷 参考文献

 Zhao, W; Zhang, J.; Sun, Z.; Xiao, G.; Zheng, H.; Li, K.; Li, M.; Zou, B. CCS Chem. 2025, DOI: 10.31635/ccschem.025.202405293

 Gao, D.; Tang, X.; Xu, J.; Yang, X.; Zhang, P.; Che, G.; Wang, Y.; Chen, Y.; Gao, X.; Dong, X.; Zheng, H.; Li, K.; Mao, H. PNAS, 2022, 119, e2201165119.

基于钻石对顶砧的动态加载技术及相关科学研究

苏磊

北京高压科学研究中心

动态高压加载技术的发展目前正处于关键的上升阶段。动态加载钻石对顶砧 装置是近年来备受高压界关注的研究装置之一,它可以有效地用来进行亚稳态材 料制备、超高压化学、相变动力学研究等,在化学、材料学、凝聚态物理学、地 学等方面有着重要的应用前景。本文介绍一种新型的与原位时间分辨光谱测试系 统、原位加热系统等结合的、具有较大增压速度和可测量压力范围的动态加载钻 石对顶砧装置(Matter and Radiationat Extremes, 2022, 7, 1)。基于该动态加载装置, 详细讨论在高压力下物质的格林艾森参数测量(Physical Review Letters, 2023, 131, 26)、碳纳米管力学性能研究(Acta Materialia, 2022, 228, 117776)、力致发光 (Nano Energy, 2021, 85, 106005),高压化学反应(Nature Communications. 2025, 16, 357)等方面的最新研究进展。

参考文献:

- 1) Matter and Radiationat Extremes, 2022 7, 1
- 2) Phys. Rev. Lett. 2023, 131, 266101.
- 3) Acta Materialia, 2022, 228, 11776.
- 4) Nano Energy, 2021, 85, 106005.
- 5) Nature Communications. 2025, 16, 357.

超/亚临界水反应及资源化应用

潘志彦1

(¹浙江工业大学环境学院,浙江省杭州市拱墅区潮王路 18 号,310014) *Email: panzhiyan@zjut.edu.cn

摘要:针对传统超/亚临界水反应体系下相态变化及物料参数实时监测的技术瓶颈,构建耐高温高压微型可视毛细管反应器联用拉曼光谱-冷热台的新型原位在线研究平台,开展超/ 亚临界水中疏水性有机物溶解特性、水分子间氢建的演变规律等科学问题的研究。基于超亚 临界水反应在"双碳"大背景下的应用导向,系统开展了超/亚临界水中污染物的氧化及资 源化、聚合物解聚及煤与塑料共液化等应用基础研究。其中,高盐高浓高毒有机废水亚临界 氧化及废盐资源化新集成技术已成功应用于医药、农药、染料和电子化学品等行业,在多项 工程应用中实现有机危险废物的无害化处理和磷酸盐氯盐的分级回收。

关键词:超/亚临界;水反应;可视毛细管反应器;高盐高浓有机废水;资源化

参考文献

[1] Pan Z, Chou I, Burruss R. Hydrolysis of polycarbonate in sub-critical water in fused silica capillary reactor with in situ Raman spectroscopy[J]. Green Chemistry, 2009, 11(8): 1105-1107.

[2] Liu H, Pan Z. Visual observations and Raman spectroscopic studies of supercritical water oxidation of chlorobenzene in an anticorrosive fused-silica capillary reactor[J]. Environmental Science & Technology, 2012, 46(6): 3384-3389.

[3] Hu M, Zheng J, Ye Z, et al. Subcritical catalytic water oxidation for conversion DMAC waste carbon resources to acetic acid[J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2025, 13(2): 115965.

[4] Wang J, Yao Z, Dong M, et al. Rapid degradation of glyphosate via catalytic subcritical water oxidation using Ru-CuFe₂O₄: Acceleration of nitrogen migration and transformation[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025 71: 107417.

[5] Hu M, Chen M, Li Z, et al. Mechanism of catalytic subcritical water oxidation of m-nitroaniline and nitrogen conversion by CuCo₂O₄ catalyst[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 490: 151757.

[6] Chen Z, Chen H, Xu Y, et al. Reactor for biomass conversion and waste treatment in supercritical water: A review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2023, 171: 113031.

[7] Xu Y, Chen X, Wang L, et al. Progress of Raman spectroscopic investigations on the structure and properties of coal[J]. Journal of Raman Spectroscopy, 2020, 51: 1874-1884.

[8] Wang J, Zheng W, Zhang Y, et al. Raman spectroscopic technique towards understanding the degradation of phenol by sodium persulfate in hot compressed water[J]. Chemosphere, 2020, 257:127264.

[9] Wang J, Zhang J, Zheng W, et al. Using Raman spectroscopy and a fused quartz tube reactor to study the oxidation of o-dichlorobenzene in hot compressed water[J]. The Journal of Supercritical Fluids, 2018, 140: 380-386.

加压调控的若干化学反应

李军

厦门大学

junnyxm@xmu.edu.cn

摘要:加压尤其是超临界流体状态下易于实现体系的低粘、高扩散,改变体系组分的传质、 传热,改变体系的溶解性能、介电常数/极性,易于实现分离强化反应(分离耦合反应)。本 报告介绍课题组近年推进研究的若干加压催化反应体系,也简要介绍课题组利用加压实现市 场上首条气凝胶连续化工业生产的"负碳"创新技术。

专题代号: F

高压诱导二硫化钨层间耦合作用堆垛依赖性的研究

张泽娟1、秦嘉泽1、夏娟1*

1 电子科技大学大学基础与前沿研究院,四川成都,610054 Email: zejuanzhang@uestc.edu.cn

堆垛描述了两个原子层之间的排列方式,即它们是否在方向上对齐,或者存在一定角度的偏离,即 扭转角度^[1,2]。 尽管二维材料比三维材料少了一个维度,但却多了一个自由度:堆垛自由度^[3,4]。通过 控制堆垛顺序,可以实现原子与原子之间相互作用的有效调控,从而调节二维异质结的层间耦合。

最近对二维过渡金属二硫化物(TMDCs)的研究产生了许多有趣的物理现象,为光学、电子和自旋电子应用提供了机会。在TMDCs家族中,二硫化钨(WS2)由于其独特的结构和新颖的物理性质而引起了人们相当大的兴趣,使得二维WS2成为众多应用领域的高度有前途的候选材料,例如记忆电阻器、发光器件、光调制器等。然而,与大多数二维TMDCs不同, 3R和2H堆垛的WS2在常压下几乎没有堆垛依赖性,这阻碍了对其物理性质和潜在应用的进一步探索。

在本研究中,我们通过高压实验在 3R 和 2H 堆垛的双层 WS2 中实现了层间耦合高效调制,实现了 压力触发的堆垛依赖性。通过原位超低频(ULF)拉曼测量,我们确定了四个 ULF 拉曼峰(SM、BM、 X1和 X2)的振动本质,并发现在常压下所有拉曼谱都未表现出堆垛依赖性。加压之后,双层 WS2 的层 间距大大压缩,因此层间耦合大大增强。压力触发的双层 WS2 层间耦合显示出明显的堆垛依赖性,这 是首次实验观察到的。我们的研究结果表明,通过适当调节,可以打破不同堆垛的双层 WS2 之间的简 并性,这可能有助于探索生长方法的定制,以获得具有定制堆垛方式的双层和多层 TMDC 晶体。



图 1 左: 金刚石对顶砧 (DAC),右: 双层 WS2 中高压诱导的堆垛依赖性

关键词: 堆垛依赖; 二维材料; 高压技术

- [1] Xia, J; Yan, J.; Wang, Z. et al. Nat. Phys. 2021, 17: 92.
- [2] Jiao, C.; Pei, S.; Wu, S.; Wang, Z.; Xia, J. Rep. Prog. Phys. 2023, 86: 114503.
- [3] Pei, S.; Wang, Z.; Xia, J. Materials & Design 2022, 213: 110363.
- [4] Pei, S.; Wang, Z.; Xia, J. ACS Nano 2022, 16: 11498.

高压调控有机−无机相互作用优化杂化钙钛矿局域结构-提升非线

性光学性能

<u>毛禺鈦1</u>、 郭嵩蒿1、 杨文革1*、 吕旭杰1*

1北京高压科学研究中心,上海市浦东新区蔡伦路 1690 号 6 号楼, 202103

Email: yuhong.mao@hpstar.ac.cn

摘要:

ABX₃型有机-无机杂化钙钛矿因其优异的光电性能和结构可调控性,在光电等领域具有广阔的前景。通过改变 B 位金属阳离子和 X 位卤素离子,可以实现对其结构和性能的多样化调控。另一方面, A 位有机阳离子带来的有机-无机相互作用如何影响杂化钙钛矿的结构和物性,尚未得到清晰的认知,有待进一步的研究。

本工作选择具有过大 A 位阳离子的 MHyPbBr₃(MHy⁺ = Methylhydrazinium, CH₃NH₂NH₂⁺)作为研 究体系。由于其显著的有机-无机相互作用,该材料表现出独特的结构畸变和非线性光学性能。我们利 用高压原位表征技术,结合理论计算,系统研究了其晶体结构、电子结构和光电性能的演变规律。结果 表明,压力可以有效增强 MHyPbBr₃的有机-无机相互作用,引起大的结构极化,使其二次谐波响应显 著提升,在 1.5 GPa 处实现了 18 倍的增强。此外, MHyPbBr₃ 的有序-无序转变温度在环境压力下为 408 K,而在 0.5 GPa 的压力下显著提升至 454 K。本工作通过高压实现了有机和无机结构单元的可控调制, 系统探究了有机-无机相互作用与钙钛矿结构和光电性能的内在关联。



图 1 (a) MHyPbBr3 中有机-无机相互作用示意图,包括 Pb-N 作用和 N-H ••• Br 氢键。(b) 压力下 Pb-N 和 Pb-Br 键的键长变化。(c) (d) MHyPbBr3 的 SHG 强度和有序无序转变温度在压力下的演化。

关键词: 杂化钙钛矿; 有机-无机相互作用; 结构畸变; 二次谐波响应; 有序无序转变温度。 参考文献

[1] Yuhong Mao, Songhao Guo, et al. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 23842–23848.

压力调控下二维过渡金属硫族化合物的激发态动力学研究

牛光明, 王晓伟, 隋来志*, 袁开军

中国科学院大连化学物理研究所,大连,116023 Email: lzsui@dicp.ac.cn

摘要:

二维过渡金属硫族化合物(TMDCs),如 MoS2和 PdSe2,已在纳米科技和量子材料领域显示出卓 越的物理和化学特性,引起了广泛的科研兴趣。这些材料独特的电子和光学性质,尤其在外部环境因素 如压力的作用下,表现出与三维体相材料截然不同的响应。实际上,高压可以显著改变这些二维材料的 晶体结构、电子能带结构以及其它基本物理性能,从而潜在地改善或调制其电子设备的性能。然而,尽 管这些影响已被文献报道,但是高压环境下这些材料的电子与激子动态的详细机理仍充满挑战,特别是 如何通过外部压力精确调控材料的电子性质及其底层机理等问题仍待解决。我们对 MoS2在高压环境下 进行了深入研究,发现高压能调节层间相互作用,加速激子的解离,显著降低激子的 Mott 密度并加速 光诱导的 Mott 转变。这一现象为理解材料在非平衡电子态下的行为提供了新的视角。同时,我们的研 究也探索了 PdSe2在不同压力下的电子结构和声子动力学行为。发现压力不仅影响其电子带隙,还显著 影响声子散射过程,进一步调控了材料的载流子动力学。这些发现为开发基于压力调控的高性能电子和 光电子设备提供了理论和实验基础。这些研究成果极大地拓展了我们对二维材料在极端环境下电子行为 的理解,并为基于这些独特材料的应用开发,如高性能传感器、纳米级开关和能量存储设备等,提供了 宝贵的理论和实验依据

关键词:二维材料;高压;激子

[1] Wang, X.; Niu, G.; Jiang, J.; Sui, L.; Zeng, X.; Liu, X.; Zhang, Y.; Wu, G.; Yuan, K.; Yang, X. ,*Nano Lett*, **2024**, *24*, 9058-9064.

[2] Niu, G.; Jiang, J.; Wang, X.; Che, L.; Sui, L.; Wu, G.; Yuan, K.; Yang, X., J Phys Chem Lett, 2024, 15, 1623-1635.

[3] Li, Q. Y.; Sui, L. Z.; Niu, G. M.; Jiang, J. T.; Zhang, Y. T.; Che, L.; Wu, G. R.; Jin, M. X.; Yuan, K. J., *Physical Review B*, **2021**, *103*.

高压下纤维素的结构与性能

<u>宋广杰</u>、张军

中国科学院化学研究所,北京市海淀区中关村北一街2号,100190 Email:gsong@iccas.ac.cn

摘要:

纤维素作为一种自然界储量最大、可降解且可再生的天然高分子材料,在能源、环境和生物医学等 领域展现出巨大的应用潜力。然而,由于其独特的分子链以及聚集态结构,它不熔融、难溶解,使得传 统加工方法面临重大挑战。这直接导致了纤维素产量大而有效利用却不高的困局,但为多学科交叉研究 提供了重要机遇。我们主要围绕高压¹、磁场²、剪切、拉伸和温度³等外场条件,采用固体核磁共振和 X射线散射技术,探究外场下纤维素结构与性质的调控机制。本报告主要介绍的内容(1)纤维素 IB 晶体在纤维轴方向较高的弹性模量是其作为结构材料的重要原因。我们将静水压压缩和单轴拉伸实验相 结合,测出纤维素纳米晶体的弹性模量,通过 DFT 计算验证了实验结果,并发现纤维素晶体的弹性性 质具有晶体应变速率依赖性,且微观层面上具有非对称性¹;(2)天然纤维素具有复杂的多层次结构, 在高压剪切作用下纤维素纳米晶体发生塑性变形,观察到了纤维素纳米晶中原纤滑移(结晶度不变)和 原纤内分子链滑移(非晶化)两种塑性变形机制;(3)弱磁性物质(抗磁性物质和顺磁性物质)的磁效 应往往过于微弱,过去仅仅在理论上能够理解这些现象,随着磁场技术的快速发展,现在这些效应可以 在实验上容易地实现,并广泛用于材料研究中。将微纳晶体(尺寸几百纳米到微米)在磁场下三维取向, 用于单晶核磁实验确定了纤维素二糖的化学位移张量²。

关键词:静水压,旋转剪切,纤维素

参考文献

- Song, G.; Lancelon-Pin, C.; Chen, P.; Yu, J.; Zhang, J.; Su, L.; Wada, M.; Kimura, T.; Nishiyama, Y., Time-Dependent Elastic Tensor of Cellulose Nanocrystal Probed by Hydrostatic Pressure and Uniaxial Stretching. The Journal of Physical Chemistry Letters 2021, 12 (15), 3779-3785.
- Song, G.; Kusumi, R.; Kimura, F.; Kimura, T.; Deguchi, K.; Ohki, S.; Fujito, T.; Simizu, T., Single-crystal NMR approach for determining chemical shift tensors from powder samples via magnetically oriented microcrystal arrays. Journal of Magnetic Resonance 2015, 255, 28-33.
- Diao, H.; Song, G.; Zhang, J., Morphology and Lamellar Twisting of Spherulites in Cellulose–Ionic Liquid: Effect of Molecular Weight and Temperature. Macromolecules 2024, 57 (4), 1604-1611.

专题代号: F

高温高压下绿帘石体系电导率

王多君、张芝情 申珂玮

中国科学院大学地球与行星科学学院 Email: duojunwang@ucas.ac.cn

摘要:

俯冲板块不断地将大量的地表水输送到地球内部。含水矿物作为水的主要宿主,其脱水过程显著影响着俯冲带的物理性质和水循环。绿帘石为岛状硅酸盐,其结构不同于其他层状或链状硅酸盐矿物,因此有必要研究其传导机理与脱水过程之间的关系。在本研究中,我们在不同温度和压力下测量了不同成分的绿帘石族的电导率,并且研究了其脱水速率。研究发现绿帘石脱水后,其电导率会发生多阶段的变化,这与不同的产物相对应。当温度超过绿帘石脱水阈值时,其电导率呈现先慢后快的上升趋势。这些变化归因于传导机制和脱水速率的耦合作用。与其他含水矿物相比,绿帘石脱水率低。研究表明,绿帘石的超慢脱水是低温条件下 130~250 km 持续高电导率的关键因素

本研究为国家自然科学基金项目(91958216)资助。

关键词: 绿帘石 电导率 脱水 参考文献

- Hu, H., Dai, L., Li, H., Hui, K., & Sun, W. (2017). Influence of dehydration on the electrical conductivity of epidote and implications for high-conductivity anomalies in subduction zones. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 122(4), 2751-2762. https://doi.org/10.1002/2016jb013767
- Wang L., Wang, D., & Shen, K. (2020). Electrical Conductivity of Talc Dehydration at High Pressures and Temperatures: Implications for High-Conductivity Anomalies in Subduction Zones. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 125(10). https://doi.org/10.1029/2020jb020091

压强调控零维锑基金属卤化物中的光诱导多面体畸变

王家祥、王玲瑞、郭海中

郑州大学物理学院 Email: hnwangjiaxiang@163.com

摘要:

最近,在零维锑基金属卤化物中越来越多地观察到了基于激发依赖性发射的双发射现象。然而,这两种发射的起源仍存在争议。在此,我们利用高压研究了典型的零维锑基金属卤化物 (TTA)₂SbCl₅(TTA = 四乙基铵)的结构与光学关系,并揭示了其发射背后的机制。随着压力的增加,(TTA)₂SbCl₅在 303 nm 激发下的高能和低能双发射峰在约 5.7 GPa 时过渡到单个低能发射峰。同时,355 nm 激发的单个宽带发射峰在整个压缩过程中保持了一个明显的低能发射峰,表现出与激发相关的发射颜色响应。结合实验结果和密度泛函理论计算,观察到的现象归因于 (TTA)₂SbCl₅ 中[SbCl₅]²⁻多面体的光诱导畸变的压力约束。这些发现揭示了局部结构与受激发射之间的关系,为锑基金属卤化物的调制提供了新的视角和见解。



图 1. Zero-dimensional antimony-based metal halide (TTA)₂SbCl₅, exhibits dual emission at 303 nm excitation and a single emission peak at 355 nm excitation. It is shown that the excitation-dependent emission phenomenon in this is associated with photo-induced polyhedra distortion, and that the pressure can effectively modulate such changes.

关键词: 高压、激发相关发射、光致多面体畸变、零维、金属卤化物 参考文献

- Jiaxiang Wang, Lingrui Wang, Yuqiang Li, Ruijing Fu, Youjia Feng, Duanhua Chang, Yifang Yuan, Han Gao, Sheng Jiang, Fei Wang, Er-jia Guo, Jinguang Cheng, Kai Wang, Haizhong Guo, and Bo Zou. *Adv. Sci.* 2022, 9: 2203442.
- Jiaxiang Wang, Yifang Yuan, Cailong Liu, Ruijing Fu, Lingrui Wang, Fei Zhang, Liang Ma, Sheng Jiang, Zhifeng Shi and Haizhong Guo. *Phys. Rev. B* 2023, 107, 214111.

专题代号: F

高压下材料的超快动力学

袁开军

中国科学院大连化学物理研究所,化学反应动力学全国重点实验室,辽宁大连,116023 Email: kjyuan@dicp.ac.cn

摘要: 压力作为一种能调节材料内部原子间相互作用的条件,为电子结构与光学特性的显著转变提供了 独特的实验平台。因此,对于压力条件下材料的光学与超快动力学属性的研究,对揭示物质的微观结构 与宏观性能之间的深层次联系具有不可替代的科学价值。本研究团队自主研发的超高压环境下的稳态及 瞬态光谱综合表征系统,已达到国际先进水平,为功能材料中能量迁移机制、分子激发态的超快动力学 过程及光电转换机制的深入探究提供了强大的实验平台。本报告将详细介绍利用该高压超快光谱表征系 统所开展的系列前沿研究,涵盖了在高压作用下金属卤化物钙钛矿发光机制的深入分析、二维材料中莫 特密度转变现象的探索,以及Jahn-Teller效应对PdSe2晶格结构及载流子超快动力学过程的影响研究。这 些研究成果不仅深化了我们对高压条件下材料光电特性与结构动态之间相互影响的认识,还凸显了高压 超快光谱学研究在该领域的关键作用。通过深化对这一领域的科学探索,为高性能材料的理论研究与技 术应用提供了重要的科学依据和创新思路,展现了高压超快光谱研究在探索物质深层次物理现象中的独 特优势与重要性。



Fig. 1 Configuration coordinate diagram displaying the STE and FE formation (FE, free exciton; STE, self-trapped exciton; GS, ground state; EST, self-trapping energy).

关键词:压致发光;自陷态激子;莫特密度转变;超快时间分辨光谱;高压拉曼光谱 参考文献:

- 1. Jiang, J. T.; Niu, G. M.; et al.; Yuan, K. J.*; Yang, X. M. Adv Func Mater 2023, 2312316.
- 2. Niu, G.; Jiang, J.; et al.; Yuan, K. J.*; Yang, X. M. J Phys Chem Lett **2024**, 15, 1623-1635.
- 3. Wang, X.; Niu, G.; et al.; Yuan, K. J.*; Yang, X. M. Nano Lett 2024, 24, 9058-9064.
- 4. Niu, G.; Jiang, J.; et al.; Yuan, K. J.*; Yang, X. M. Angew Chem Int Ed 2025, e202422424.

专题代号:F

典型含能材料声子非谐效应与氢键演化的理论及实验研究

郑朝阳、王巨杉、曾阳阳、于国洋、杨延强

中国工程物理研究院流体物理研究所 Email: zhengzy@yinhe596.cn

摘要:

含能材料的安全性是实现其工程化应用的前提条件,其核心科学问题在于材料微观结构对外部加载 的多元响应机制。因此,系统阐明外部加载下含能材料结构与物化性质的动态演化规律及其微观作用机 制,对揭示其安全性科学内涵具有重要意义。本报告融合第一性原理计算与玻尔兹曼输运理论,结合原 位变温变压拉曼光谱表征技术,针对典型硝基甲烷(NM)晶体的声子非谐效应、以及 FOX 与 LLM-105 晶体结构演化规律,开展了系统的理论计算与实验研究:通过对硝基甲烷晶体声子非谐性的理论分析, 构建了其热输运特性与非谐效应的定量关联模型;通过原位拉曼光谱技术,建立了氢键网络与外部压力 /温度条件的演化图谱,并结合第一性原理计算阐明了化学键合作用在极端压力条件下的重排规律,揭 示了氢键构型差异对含能材料刺激响应特性影响的物理本质。这些为建立基于量子化学的含能材料安全 性理论框架奠定了科学基础,也为低感度含能材料分子设计提供了理论指导。



图 1 NM 晶体高压拉曼光谱和声子寿命以及 LLM-105 晶体中氢键网络

关键词: 含能材料、声子非谐性、氢键、拉曼光谱、结构稳定性 参考文献

- Jushan Wang, Yangyang Zeng, Zhaoyang Zheng, Lei Zhang, Biao Wang, Yanqiang Yang, Changqing Sun. J Phys. Chem. Lett., 2023, 14, 8555.
- 2. Zhaoyang Zheng, Guoyang Yu, Gangbei Zhu, Yanqiang Yang. Chem. Phys. Lett., 2024, 837, 141061.
- Jushan Wang, Zhaoyang Zheng, Yangyang Zeng, Zanhao Wang, Guoyang Yu, Qi-Long Yan, Huashan Li, Yanqiang Yang, Biao Wang. *Phys. Chem. Phys.*, 2025, DOI: <u>10.1039/D5CP01236H</u>.

间苯二甲酸基金属有机框架的高压磷光性质研究

杨青1、杨新一1*和邹勃1*

1 吉林大学物理学院超硬材料国家重点实验室 Email: yangxinyi@jlu.edu.cn; zoubo@jlu.edu.cn

摘要: 基于三重态激子发射的室温磷光材料在光电子学、防伪标识和信息加密等领域具有广阔的应用前 景。然而,如何克服自旋禁阻的影响,有效点亮、稳定三重态激子的辐射跃迁,实现高效室温磷光发射 一直是该领域亟待解决的关键科学问题。基于此,我们报到了一种通过压强处理提高间苯二甲酸(IPA) 基金属有机框架(Zn-IPA MOFs)磷光性能的策略。结合实验和理论计算结果表明,不同程度的压强处 理工程能够定向调控 Zn-IPA MOFs 系间窜越和三重态激子的辐射跃迁过程:(1)11.4 GPa 的压强处理 能够增强 Zn-IPA 分子间 C-H…π相互作用,进而有效抑制非辐射能量耗散,促进 Zn-IPA 荧光和磷光发 射增强,最终获得量子产率为 87.0%的蓝光发射,其磷光效率从 7.7%有效提高到 31.9%;(2)20.2 GPa 的压强处理工程在增强 Zn-IPA 分子间 C-H…π相互作用的同时,促使金属与配体形成新的不对称螯合配 位并发生电子结构相变。进而促使其单重态-三重态能隙差缩小,加速系间窜越过程,调节单重态激子 和三重态激子的布居。最终使得 Zn-IPA 实现明亮的荧光/磷光混合型白光发射,量子产率从 20.9%提高 至 81.3%,磷光效率从 7.7%提高至 37.5%。本工作利用不同程度的压强处理工程将高效荧光/磷光态"定 向截获"至常压,为环境条件下高效多色编码材料的设计和开发提供了新策略。



图 1 基于压强处理工程实现高效荧光/磷光混合型蓝光和白光发射

关键词:磷光发射增强;金属-配体不对称螯合配位;压强处理工程;高效系间窜越 参考文献

- Yang, Q. et al. Brightening triplet excitons enable high-performance white-light emission in organic small molecules via integrating n-π*/π-π* transitions. *Nat. Commun.* 2024, 15, 7778.
- 2. Yang, Q. et al. Pressure treatment enables white-light emission in Zn-IPA MOF via asymmetrical metal-ligand chelate coordination. *Nat. Commun.* 2025, 16, 696.

专题代号: F

一维二硫化物基卤化铅中压力诱导的手性转变

邱文博、蔡伟照*

电子科技大学材料与能源学院 Email: wzhcai@uestc.edu.cn

摘要:在低维杂化卤化物体系中,无机框架的限制和较强的氢键作用会阻碍有机分子发生显著的构象变化,因此在外部压力作用下精确控制分子手性变化是极具挑战性的。¹在此,我们通过将柔性二硫化物基分子引入一维(1D)PbIs框架中,形成的手性杂化卤化物[NH₃(CH₂)₂S-S(CH₂)₂NH₃]PbIs·H₃O在约0.10 GPa的静水压力下会发生从聚集体到外消旋体的转变。这种可逆的非中心对称到中心对称的转变伴随着 二次谐波(SHG)的"开-关"切换以及结构中胱胺阳离子的显著构象变化。在高压外消旋相中,具有 不同手性构象(M型和P型螺旋)的两种对映体共存于晶格结构中,它们在压力下的变形类似于压缩 的机械弹簧,最终通过强烈的有机-无机H…I相互作用导致一维锯齿状PbIs链发生显著扭曲。此外,实 验研究和理论计算结果均表明,这种独特的相变会引起电子结构和光学带隙的微小变化。我们的研究结 果为通过将柔性有机分子引入无机框架来调控杂化卤化物中的分子手性和二次谐波产生特性提供了新 的思路。²



图 1 极低压力下可逆的 SHG 开关及手性结构扭转

关键词: 手性分子、二硫化物、高压研究、卤化铅钙钛矿、二次谐波产生

参考文献

- Sui, J.; Wang, N.; Wang, J.; Huang, X.; Wang, T.; Zhou, L.; Hao, H., Strategies for Chiral Separation: from Racemate to Enantiomer. *Chem. Sci.* 2023, 14, 11955-12003.
- 2. Qiu, W.; He, W.; Liu, Y.; Fu, B.; Wang, W.; He, J.; Wang, L.; Liu, H.; Cai, W. Pressure-Induced Conglomerate to Racemate Transformation in a One-Dimensional Disulfide-Based Lead Halide. *Chem. Mater.* **2025**, *37*, 2953-2963.

通过压力诱导相变提高稀土离子在 BiVO4 中的溶解度

董兴邦1、苏磊1

1北京高压科学研究中心,北京,100193

Email: leisu2050@iccas.ac.cn

摘要:采用水热法合成了 Eu³⁺离子掺杂的钒酸铋粉体,通过 X 射线衍射(XRD)、拉曼光谱和紫外-可见 漫反射光谱研究 Eu³⁺离子掺杂对晶体结构的影响。XRD 和 Raman 结果表明 Eu³⁺离子在 fergusonite-BiVO₄ 中的掺杂溶解度极小。掺杂超过 0.5mol %时,会发生从 fergusonit 到锆石结构的结构转变。这种相变导 致带隙增强,从而限制了其光催化性能。在压缩时,锆石 BiVO₄:Eu³⁺是不稳定的,并且在 5 GPa 以上呈 现锆石到白钨矿的转变。值得注意的是,这种转变是不可逆的,高压白钨矿结构在压力释放后转变 fergusonit 结构而不是原来的锆石结构。BiVO₄:Eu³⁺在一个加压-卸压循环中从锆石到白钨矿到 fergusonit 的转变顺序提供了一种合成更高掺杂含量的 fergusonit-BiVO₄:Eu³⁺的方法。这一结果证实了压力是获得 功能材料的新结构和新物理性质的一种有效策略。



图 1 压力诱导相变提高稀土离子在 BiVO4 中的溶解度。

关键词:压致相变,光催化, 参考文献

- Su, L., Shi, K., Zhang, L., Wang, Y., & Yang, G. (2022). Static and dynamic diamond anvil cell (s-dDAC): A bidirectional remote controlled device for static and dynamic compression/decompression. Matter and Radiation at Extremes, 7(1).
- Dong, X., Huangfu, Z., Liang, Y., Yuan, C., Li, S., Zhu, X., ... & Yang, G. (2021). Increasing doping solubility of RE³⁺ ions in fergusonite BiVO₄ via pressure-induced phase transition. The Journal of Physical Chemistry C, 125(40), 22388-22395.

专题代号: F

压力诱导零维杂化 Sb 基钙钛矿双发射中心的形成与变化

蔡梦瑶¹,牛光明¹,隋来志^{1,*},袁开军^{1,*}

1中国科学院大连化学物理研究所,大连,116023

*Email: caimengyao@dicp.ac.cn

摘要:零维杂化金属卤化物钙钛矿的种类繁多,结构组成也更加多样化。此外,其还具备良好的环境稳定性,较高的光致发光量子产率,可调谐的发射颜色等优点。其中,Sb³⁺基材料因具有与Pb²⁺相似的ns² 电子构型,在保持铅基钙钛矿优异光电性能的同时,又有效规避了铅基材料的毒性问题,成为环境友好 型光电材料的重要候选体系。本研究以零维杂化钙钛矿 TPP₂SbBrs为研究对象,通过高压原位光谱技术 系统研究了其在高压下的结构演变与光物理行为。该材料在环境压力下表现出低能三重态发射的特征, 通过压力对[SbBrs]²⁻金字塔单元进行调控实现了低能三重态到高能三重态的转换。该工作不仅阐明了零 维钙钛矿中压力-结构-发光性能的构效关系,还为开发具有压力响应特性的新型光电材料提供了设计思 路。



图 1. (a) and (b) PL spectra of TPP₂SbBr₅ under 378 nm excitation. (c) PL intensity evolution with pressure. (d) PL peak shift with pressure. (e) Raman spectra under varying pressures.

关键词:零维钙钛矿;Sb基卤化物;高压;STE发射

专题代号:F

混合价态化合物 Eu9MgS2B20O41 在压力下的结构稳定性与带隙调控

符博洋、蔡伟照*

电子科技大学材料与能源学院 Email: byfu@uestc.edu.cn

摘要:

近年来,Kagomé晶格材料因其独特的几何阻挫和电子结构特性成为凝聚态物理的研究热点¹⁻²。本研究通过高压原位同步辐射X射线衍射(0-64.4 GPa)和紫外-可见吸收光谱(0-37.9 GPa)系统研究了新型Kagomé层状混合价态化合物Eu₉MgS₂B₂₀O₄₁的高压行为。结果表明该材料在超高压下展现出优异的结构稳定性,始终保持六方相(P6₃/m)且未发生价态转变,体弹性模量达167.3-180.8 GPa (金刚石的40%)。这种稳定性源于BO₃/BO₄刚性单元,其中*c*轴压缩率高达1.07(2)TPa⁻¹,这一线性 压缩系数值明显低于典型晶体材料线性压缩系数值(5-20 TPa⁻¹)。

电子性质研究表明,压力导致带隙从 2.47 eV(常压)线性降至 1.96 eV(37.9 GPa),变化率-0.013 eV/GPa,主要归因于 Eu-O 键长缩短引起的能带展宽。该过程完全可逆,且带隙对压力的敏感性显著低于典型硫化物。

这些发现不仅揭示了 Kagomé基混合价态化合物的高压特性,也为开发高压稳定功能材料提供了新 思路。



图 1 (a) Eu₉MgS₂B₂₀O₄₁在高压下的紫外-可见光吸收光谱。(b) 加压过程中样品的照片。(c) 样品在升压 和降压过程中的光学带隙变化。红线表示高压实验数据的线性拟合结果, 插图为吸收光谱的 Tauc 曲线,

以及常压和卸压后样品的带隙值。

关键词: 高压物理、Kagomé晶格、混合价态 参考文献

1. Anderson P W 1987 Science 235 1196

2. Guguchia Z, Khasanov R and Luetkens H 2023 npj Quantum Mater. 8 41

专题代号: F

压力诱导晶体中的分解反应及其反常压致变色行为

郭丽慧、马玉国*

北京大学化学与分子工程学院 Email: ygma@pku.edu.cn

摘要:

压致变色材料是一类在压力作用下表现出显著光学性质变化的材料,有望应用于压力传感、损伤探 测等领域。基于化学反应的压致变色晶体通常表现出高对比度的颜色变化,然而已报道工作主要聚焦于 具有扭曲环状化合物的开环反应,晶体通常在加压过程中变色,现象较为相似。本工作基于分解反应开 发压致变色晶体,研究了三芳基甲醇衍生物晶体在静水压作用下的反常变色行为。晶体在加压过程中保 持无色,而在降压过程中逐渐由无色变为蓝绿色,颜色变化来源于分子的碳氧键异裂。分解反应速率随 压力降低而加快,证明静水压能够促进活化体积大于零的化学反应。进一步研究表明,晶胞中四聚体中 心的氢键网络对分解反应起关键作用,加压对氢键的增强以及降压释放的空间共同促成了分解反应的发 生。本工作丰富了晶体压致变色的化学反应类型,揭示了超分子结构对压致变色行为的重要影响,为压 致变色晶体的设计提供了新思路。

关键词: 高压化学; 分解反应; 压致变色 参考文献

- 1. X. Meng; G.-Y. Qi; C. Zhang; K. Wang; B. Zou and Y.-G. Ma. Chem. Commum. 2015, 51, 9320.
- 2. X.-Y. Deng, H.-W. Guo, X. Meng, K. Wang, B. Zou and Y.-G. Ma. Chem. Commun. 2019, 55, 4663.

热量或高压促进的晶体中点击聚合反应实现荧光增强

韩建军,马玉国*

北京大学化学与分子工程学院 Email: ygma@pku.edu.cn

摘要:

分子晶体材料具有结构明确且长程有序等特点,为宏观能量向微观分子的传递提供了有效路径,便 于围绕构效关系进行深入研究。目前,晶体中叠氮和端炔的点击反应相关研究取得了一系列重要进展, 我们课题组^[1-4]前期利用芳烃-氟代芳烃相互作用、氢键、静电作用等有效调控分子的预组织模式,在加 热或压力作用下,以高产率和高区域选择性实现固相点击聚合反应,构筑了一系列主链含有苯、氟苯的 聚合物。在此基础上,本工作中我们将荧光团引入固相点击聚合反应体系,所得晶体在加热条件下经历 拓扑聚合反应,过程伴随着荧光的不可逆显著增强,可通过肉眼可分辨的荧光变化便捷地监测固相反应 进度。通过合理控制温度,可使其经历单晶到单晶转变,获得可准确解析结构的聚合物单晶材料。另外, 加压同样能够促进单体的固相反应,体系经历加卸压循环后荧光增强。该工作为实现晶体内分子的高效 定量转化、明晰聚合前后构效关系、开发多重刺激响应晶体材料提供了新思路。

关键词:点击聚合反应,单晶到单晶转变,高压化学,荧光增强参考文献:

^{1.} Ni, B.-B.; Wang, K.; Yan, Q.; Chen, H.; Ma, Y.; Zou, B. Pressure accelerated 1,3-dipolar cycloaddition of azide and alkyne groups in crystals. *Chem. Commun.* **2013**, *49*, 10130-10132.

^{2.} Chen, H.; Ni, B.-B.; Gao, F.; Ma, Y. Pressure-accelerated copper-free cycloaddition of azide and alkyne groups pre-organized in the crystalline state at room temperature. *Green Chem.* **2012**, *14*, 2703-2705.

^{3.} Meng, X.; Chen, C.; Deng, X.; Wang, Z.; Chen, Q.; Ma, Y. Building a cocrystal by using supramolecular synthons for pressure-accelerated heteromolecular azide–alkyne cycloaddition. *Chem. - Eur. J.* **2019**, *25*, 7142-7148.

^{4.} Meng, X.; Xu, S.; Chen, C.; Guo, L.; Ma, Y. Topochemical 1,3-dipolar cycloaddition polymerization assisted by non-covalent interactions. *CrystEngComm* **2023**, *25*, 2706-2711.

无铅卤化物双钙钛矿(CH₃NH₃)₂PtI₆的压致带隙闭合

侯思羽,a, 王玲瑞,a,*付瑞净b,*

a 郑州大学物理学院,郑州 450001 b 五邑大学应用物理与材料学院,江门 529020

Email: wanglr@zzu.edu.cn; ruijingfu wyu@163.com

摘要:无铅卤化物双钙钛矿由于其优异的稳定性和良好的带隙,最近引起了人们的极大关注,使其成为 太阳能电池应用的有希望的候选者。然而,它们的结构特征与本征带隙之间的关系仍未得到充分的研究。 本文提出了一种利用高压技术研究典型卤化物双钙钛矿 MA2PtI6 (MA⁺ = CH3NH3⁺)结构-带隙相关性的 方法。MA2PtI6 的带隙在 1.2 GPa 前后以 0.063 eV/GPa 和 0.079 eV/GPa 两种不同的速率有效减小,并随 着压力的进一步增大而逐渐闭合。这些光学变化与压力诱导 MA2PtI6 的结构演化密切相关。此外,在 [PtI6]²⁻八面体的压力畸变驱动下,从三斜相(*R*-3*m*)到单斜相(*P*2/*m*)的相变发生在 1.2 GPa,并在 2.0 GPa 时完成,这是导致带隙变化的原因。这些发现为卤化物双钙钛矿的结构和带隙调谐的潜在应用铺平了道 路。



关键词: 卤化物双钙钛矿,高压,带隙闭合,相变。

[1] Igbari F, Wang Z-K and Liao L-S 2019 Adv. Energy Mater. 9 1803150

[2] Zhao X-G, Yang D, Ren J-C, Sun Y, Xiao Z and Zhang L 2018 Joule 2 1662

[3] Wolf N R, Connor B A, Slavney A H and Karunadasa H I 2021 Angew. Chem. Int. Ed. 60 16264

专题代号: F

压力和温度双热力学参数识别并调控二维钙钛矿多态发射行为

<u>胡海洋1、牛光明1、隋来志1,*、袁开军1,*</u>

¹中国科学院大连化学物理研究所化学反应动力学全国重点实验室,大连,116023 *Email: lzsui@dicp.ac.cn

低维钙钛矿由于其优异的光电性质以及环境稳定性,在近年来受到广泛的关注。特别是具有可调白 光发射的二维 RP 钙钛矿在光学器件的应用中至关重要,但对于组成白光发射的宽带发射峰的起源仍存 在争议,这阻碍了对其发射行为的了解和阐明。本研究中利用原位高压和低温 PL、532 nm 带内激发及 样品对比实验,明确区分并揭示了二维 RP 钙钛矿(NEA)2PbBr4 的三类发射路径:自由激子(NE)、自 陷激子(STE)和缺陷态(DE),并澄清了其宽带发光起源中自陷激子与缺陷态贡献的争议。通过施加 不同压力与温度实现对发射路径的调控,结果显示发射行为与晶体结构和激发态能量景观密切关联:高 压下 STE 发射猝灭、DE 占比增强;温度变化引发发光由缺陷主导转为 STE 主导再回到缺陷主导,实 现多态发光转换,体现出(NEA)2PbBr4 可调控的多态发光能力。此外,结合原位高压飞秒瞬态吸收光谱, 首次在环境条件压力直至 9 GPa 的高压下均观察到基态吸收漂白(GSB)信号,明确了超快载流子动力 学演变过程。相干声子振荡行为的变化和多重寿命分量拟合结果进一步实验证实了压力以及升温调控下 电子-声子耦合强度的削弱趋势。为设计并优化高效照明和多功能光电材料提供了新的思路。



图 1 (a) PL spectra of NEA₂PbBr₄ under 355 nm excitation at various pressures. (b) Power-dependent PL intensities of the NE and BE peaks at 80 K under 355 nm excitation. (c) Steady-state absorption spectra of the sample under different pressures. (d, e) Pressure-dependent PL spectra under 532 nm excitation for Sample 1 and Sample 2, respectively. (f) Dual-axis plot of integrated PL intensity as a function of pressure for Sample 1 (blue dotted line and left axis) and Sample 2 (red dotted line and right axis)

关键词:二维 Ruddlesden-Popper 钙钛矿;高压;温度;载流子动力学

压力诱导非晶化驱动的杂化镉卤化物

带隙缩小和不可逆色移

黄乙甲,王家祥,王玲瑞*

郑州大学物理学院,郑州 450001 Email: wanglr@zzu.edu.cn

摘要:近年来,压力诱导非晶化 (PIA)作为动态调控材料光学特性的新途径受到广泛关注。 本文分别研究了三种不同杂化镉卤化物在高压下的非晶化行为及其对带隙和光学性能的影 响。研究发现,通过压力处理,[BPy]2CdX4 (X = I、Br、Cl)发生不可逆的非晶化转变,导 致带隙显著缩小,并伴随明显的压致变色现象。值得注意的是,当X位为 Br 和 Cl 时,经 过压力处理后分别达到初始发射强度的 27.9 倍和 6.2 倍,产生的明亮的暖黄光与橙黄光在 环境条件下仍然可以长期保存,克服了传统的无法截获高压下明亮荧光的困难。另外,通过 原位高压X射线衍射 (ADXRD)和拉曼光谱揭示了非晶化过程中[CdX4]²⁻四面体结构单元 的畸变及长程有序的丧失,是带隙调控与不可逆色移的关键因素。这种不可逆色移与带隙调 控行为为开发光致变色存储材料和压力传感器件提供了新的设计策略,同时拓展了非晶工程 在柔性光电领域的应用前景。



关键词:压力诱导非晶化;杂化镉卤化物;带隙缩小;不可逆色移;高压调控

参考文献:

[1] T. Zhang, Y. Yin, X. Yang, et al. "Space-confined charge transfer turns on multicolor emission in metal-organic frameworks via pressure treatment." Nat. Commun. 16, 1 (2025).

[2] D. Zhao, G. Xiao, Z. Liu, et al. "Harvesting Cool Daylight in Hybrid Organic - Inorganic Halides Microtubules through the Reservation of Pressure - Induced Emission." Adv. Mater. 33, 31 (2021).

[3] R. Fu, W. Zhao, L. Wang, Z. Ma, G. Xiao, B. Zou. "Pressure - Induced Emission toward Harvesting Cold White Light from Warm White Light." Angew. Chem. Int. Ed. 60, 18 (2021).

压力调谐声子辅助机制实现零维杂化锰卤化物高效反斯托克斯发射

刘鑫1,牛光明1,隋来志1,*,袁开军1,*

1中国科学院大连化学物理研究所,大连,116023

*Email: lzsui@dicp.ac.cn

摘要: 上转换(UC)光致发光通过将低能光子转化为高能发射,为光电与制冷技术提供了革 新潜力,但其效率受限于非辐射损耗与能级失配,因此探索有效的调控策略至关重要。其 中,声子辅助上转换(PAUC) 通过调节电子-声子相互作用,提高电子跃迁概率,被认 为是优化 UC 过程的有效手段。本研究提出利用高压这一物理手段调控PAUC过程,以实 现其增强效应。以零维Mn基有机-无机杂化金属卤化物(TEA)₂MnCl₄为模型体系,系统探究 了高压条件下其上转换发光特性的演变规律。实验结果表明,增加压力导致晶格压缩和晶 体场增强,优化电子跃迁路径,显著提高UC发射。该研究表明,压力工程是一种有效的手 段,用于优化零维杂化锰卤化物中的声子辅助上转换过程,为设计高效上转换材料提供了 新的思路。



图 1 (TEA) 2MnCl4 在(a) 378 nm 和(b) 532 nm 激发下的 PL 光谱。(c) PL 峰随压力的变化。(d) PL 强 度随压力的变化。(e)不同压力下的拉曼光谱。

关键词:零维钙钛矿;锰基卤化物;高压;声子辅助上转换

高压下含能材料的炔基聚合研究

<u>孙澜轩</u>、齐广宇

中国工程物理研究院化工材料研究所 Email: <u>sunlanxuan23@163.com;</u> qiguangyu@caep.cn

摘要:

压力产生紧密堆积的高密度材料,从而为获得高能量密度材料提供了一个有前途的策略。然而,高 压下含能材料的新相或新结构在环境条件下往往是不可淬灭的。本文首次介绍了高压拓扑化学方法在环 境条件下制备稳定含能材料的方法。设计并制备了一种压力诱导可聚合的高能材料 PIP-1。实验测量表 明,PIP-1 的聚合是由 C=C 键的断裂和 C=C 键的生成引起的。与实验结果一致,密度泛函理论计算进 一步揭示单体 PIP-1 聚合生成 1D PIP-1 带,减压后聚合后的 PIP-1 密度增加 4.9%。高压高能量密度结 构的成功实现,为先进可聚合含能材料的设计提供了新的思路。



图 1 压力诱导拓扑化学聚合

关键词: 高压、含能材料、拓扑化学、压力诱导聚合参考文献

^{1.} Qi, Guangyu, et al. CCS Chemistry, 2023, 5(8), 1815-1826.

Sb³⁺掺杂的一维双钙钛矿(TMA)₂NaInCl₆纳米晶的压力诱导结构相 变和性能调控

王文欣, a 王玲瑞, a* 郭海中 a, b*

a 郑州大学物理学院,郑州 450001 b 河南省科学院量子材料与物理研究所,郑州 450046 Email: wanglr@zzu.edu.cn; hguo@zzu.edu.cn.

摘要: 近年来,一维有机无机杂化钙钛矿以其独特的结构和光电性能引起了人们的广泛关注。近期研 究聚焦于通过系统优化该类材料的微纳结构,旨在实现该材料体系在跨领域应用中功能参数的协同优 化。本文利用高压技术对 In 基钙钛矿 Sb³⁺:(TMA)₂NaInCl₆(其中 TMA⁺=C₄H₁₂N⁺)进行了研究,成功实现 了广域压力条件下光电性能的定向优化。其八面体[NaCl₆]⁵⁻和八面体[InCl₆]³⁻交替连接形成长链,八面体 链之间被有机分子基团 TMA⁺隔开形成一维结构。在这种钙钛矿中观察到发射增强与压致变色现象,这 归因于[InCl₆]³⁻/[SbCl₆]³⁻八面体的收缩。同时,由于[InCl₆]³⁻/[SbCl₆]³⁻八面体的畸变,高压诱导发生结构 相变,且压力的作用下带隙连续减小。本研究为开发具有增强光学功能的掺杂双钙钛矿提供了有实验与 理论基础。



图 1 Sb³⁺:(TMA)₂NaInCl₆的 PL 谱在压力下的变化

关键词: 1D 卤化物双钙钛矿,激发相关发射,高压,压力诱导发射增强,相变参考文献

[1] R. Fu, Y. Chen, X. Yong, Z. Ma, L. Wang, P. Lv, S. Lu, G. Xiao, B. Zou, Pressure-induced structural transition and band gap evolution of double perovskite Cs2AgBiBr6 nanocrystals, Nanoscale 11(36) (2019) 17004-17009.

[2] Q. Li, Y. Wang, W. Pan, W. Yang, B. Zou, J. Tang, Z. Quan, High-Pressure Band-Gap Engineering in Lead-Free

Cs2AgBiBr6 Double Perovskite, Angewandte Chemie International Edition 56(50) (2017) 15969-15973.

[3] J. Wu, F. Lin, S. Zhang, H. Wang, J. Yao, X. Shen, N. Luo, D. Huang, R. Zeng, One-Dimensional Organic–Inorganic Hybrid Double Perovskites with Near-Unity Photoluminescence Quantum Yield and Advanced Multifunctional Applications, Chemistry of Materials 36(8) (2024) 3851-3860.

高压下绿光/蓝光稀土 MOFs 荧光增强研究

王艺璇

综合极端条件高压科学中心,吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室,长春, 130012

Email: wangyixuan19@jlu.edu.cn

摘要:

金属有机框架(MOFs)由于可设计的拓扑结构和多种类的发射中心使其成为发光材料的优秀候选 材料。然而,迄今为止,由于较低的能量/电荷转移效率,许多 MOFs 材料仍然表现出微弱的发射。基 于此,我们报道了一种通过压力处理提高 Tb(BTC)(H₂O)₆和 Y(BTC)(H₂O)₆-MOFs 荧光性能的策略。这 两种 MOFs 都是由π-π堆积和氢键结合形成的三维网络结构。经过压力处理后,Tb(BTC)(H₂O)₆展现出亮 绿色荧光发射,其荧光量子产率(PLQY)由初始的 50.6 %提高到 90.4 %;Y(BTC)(H₂O)₆展现出蓝色荧 光发射,其 PLQY 从 2.8 %提高到 75.0 %。结合实验和理论计算结果表明,压力处理后的氢键协同效应 提高了氢键结合能,锁住了平面化构型。增加的平面化构型表明压力处理工程可以优化配体单重态/三 重态与 Tb³⁺间的能隙并增加电子跃迁多样性和振子强度,促进 Tb(BTC)(H₂O)₆ 中配体到金属的能量转移 和 Y(BTC)(H₂O)₆中金属到配体的电荷转移。我们的研究结果为设计具有高 PLQY MOFs 材料的结构开 辟了新的途径。



图1 在环境条件和完全释放压力下, Tb(BTC)(H₂O)₆和 Y(BTC)(H₂O)₆的光致发光性能。 关键词:压强诱导发光;金属有机框架;压强处理工程;氢键协同效应 参考文献

- Wang, Y.; Yang, X.; Liu, C.; Liu, Z.; Fang, Q.; Bai, F.; Wang, S.; Hou, X.; Feng, B.; Chen, B.; Zou, B. Angew. Chem., Int. Ed. 2022, 61: e202210836.
- Wang, Y.; Liu, C.; Yong, X.; Yang, X.; Yu, J.; Lu, S.; Bai, F.; Wang, S.; Wang, K.; Liu, Z.; Feng, B.; Hou, X.; Liu, H.; Chen, B.; Fang, Q.; Zou, B. Adv. Funct. Mater. 2023, 2300109.

压力下锰基卤化物的发光特性研究

原伟祺,a, 王玲瑞,a,*

a 郑州大学物理学院, 郑州 450001

Email: wanglr@zzu.edu.cn

摘要: 锰基金属卤化物已成为一类高度通用且可调控的材料,兼具环境友好性、高丰度、易合成性、良 好稳定性以及优异的光物理特性,在光电子学、光伏技术、磁性器件和量子技术等领域具有广泛应用前 景。这类化合物包括全无机钙钛矿(如 CsMnX₃, X=Cl、Br、I)、层状卤化物(如(C4H9NH3)2MnX4)和零维 结构(如 A4MnX₆, A=碱金属),由于 Mn²⁺离子的 3d⁵电子构型而展现出独特的电子、光学和磁学性质。 本文中,通过简单的溶剂蒸发法合成了一种新的 0D 杂化锰氯化物(C8H20N)8Mn2SbBiCl₁₈。首次研究了 其在环境条件下的光学特性,包括 PL 发射、PLQY 和平均寿命。此外,还使用密度泛函理论(DFT)方 法计算了其电子结构。此外,进行了温度刺激的(C8H20N)8Mn2SbBiCl₁₈在 300-440 K 范围内的 PL 发射实 验。利用金刚石压腔技术研究了(C8H20N)8Mn2SbBiCl₁₈的高压发光特性。同时,通过参考 Mn²⁺停留的晶 场强度变化,阐明了其光学行为的内在机制。此外,还研究了(C8H20N)8Mn2SbBiCl₁₈所得玻璃的晶体-玻璃相变和发光特性。



关键词: 锰基卤化物, 高压, 低温, 发光。 参考文献

[2] Duanhua Chang et al. Adv. Optical Mater. 2024, 12, 2302829

^[1] Xian-He Bu et al. Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2313683

^[3] Kai Wang et al. Adv. Sci. 2023, 2306937

1-甲基-3, 4, 5-三硝基吡唑的高压结构演化研究

张鸿,齐广宇,张文全

中国工程物理研究院化工材料研究所 四川省绵阳市绵山路 64 号, 邮编 621999 Email:18384238889@163.com

摘要:作为一种含能材料,炸药在爆炸过程中面临着高温高压环境,理解含能材料高压下的结构演化行为有助于深入了解含能材料在起爆、爆轰阶段的物质状态。1-甲基-3,4,5-三硝基吡唑制备简单、爆轰性能良好,有望替代 TNT 使用。对其开展高压行为研究,能够帮助构建其高压反应状态方程,对于科学认识其爆轰过程具有帮助。本研究选择 1-甲基-3,4,5-三硝基吡唑为研究对象,通过金刚石对顶砧装置对其施加压力,压力达到其爆压(约 30 GPa),并通过同步辐射 X 射线衍射、原位拉曼散射光谱研究其在高压下的结构变化。结合 第一性原理计算、分子动力学模拟结合原位高压拉曼散射光谱,我们发现了 1-甲基-3,4,5-三硝基吡唑的高压结构相变及其不可逆压致非晶化行为,并揭示 1-甲基-3,4,5-三硝基吡唑 高压行为的内在机制。



Fig. 1. In situ high-pressure Raman spectra of MTNP.

关键词: 1-甲基-3、4、5-三硝基吡唑; 金刚石对顶砧; 拉曼光谱; 同步辐射 X 射线衍射 参考文献

[1] Qi G., Cao Y, Jiang T, Zhang H., Wang Y. Energetic Mater Front. doi.org/10.1016/j.enmf.2024.03.003

氟诱导零维铅基钙钛矿的反常光学稳定性和压力下增强的发光特性

张一帆1、 陈丛丛2、 郭嵩蒿1*、 毛陵玲2*

1北京高压科学研究中心,上海市浦东新区蔡伦路 1690 号 6 号楼, 202103

2南方科技大学化学学院,深圳,518055

Email: yifan.zhang@hpstar.ac.cn

摘要:低维金属卤化物,尤其是零维(0D)化合物,因其优异的发光特性而成为卤化物钙钛矿家族的 重要成员。本研究报道了两种高发光 0D 溴化铅化合物—(BPP)₂PbBr₄和(BPPF)₂PbBr₄·2H₂O,分别缩 写为 BPP-0D 和 BPPF-0D (BPP=苄基三苯基膦鎓,BPPF=(4-氟苄基)三苯基膦鎓)。两种化合物均含 有由大体积有机阳离子分隔的跷跷板状无机单元[PbBr₄]²⁻。室温下,BPP-0D 和 BPPF-0D 分别发射黄光 和绿光,光致发光量子产率(PLQY)分别约为 15%和 55%,并表现出优异的环境稳定性,在发光二极 管领域具有应用潜力。受压条件下,BPP-0D 的光致发光强度迅速衰减,同时发光颜色从黄色变为蓝色; 而 BPPF-0D 展现出优异的光学稳定性,不仅保持绿色发光,且在 0.8 GPa 压力下光致发光强度增至约 1.7 倍,PLQY 升至 93%。对于 BPPF-0D,其分子中引入的高电负性氟基团通过增强 C-H…F 氢键和 F…F 等非共价相互作用,显著提高了材料的结构刚性和光学稳定性,使其在压力升高时仍保持发射峰位基本 不变。两种结构相似化合物在压力调制下光学性质的直接对比,凸显了通过有机阳离子分子设计来调控 材料性能的关键作用。



图 1 (a)BPP-0D 沿 b 轴的晶体结构,(b)BPPF-0D 沿 a 轴的晶体结构。(c)BPP-0D 和 BPPF-0D 中[PbBr4]²⁻ 跷跷板状阴离子结构。(d) 零维晶体结构中有机阳离子的空间构型,其中每个阳离子存在两种不同的构型。BPP+和 BPPF+的分子式分别为 C₂₅H₂₂P 和 C₂₅H₂₁FP。元素颜色标注:紫色(Pb)、蓝色(Br)、粉色(P)、红色(O)、灰色(C)、绿色(F)、浅灰色(H)。为清晰起见,图中省略了大部分氢原子。 关键词:低维金属卤化物;零维化合物;光学稳定性;压力调制;有机阳离子设计。

专题代号: G

室温高塑性陶瓷的研制

赵智胜

燕山大学亚稳材料全国重点实验室,高压科学中心,秦皇岛,066000 Email: zzhao@ysu.edu.cn

摘要:

相较于金属,陶瓷因其轻质、高强、耐高温、耐腐蚀等特性而被广泛应用于结构材料,但陶瓷室温 下缺乏塑性,容易发生脆性断裂,成为其工程应用的致命弱点。至今为止,实现陶瓷块材室温塑性这一 科学目标一直面临巨大挑战。我们利用洋葱氮化硼在热压和放电等离子烧结过程中的结构相变合成出一 种层状基元转角序构的氮化硼陶瓷块材,其内部氮化硼纳米片呈三维互锁结构,且每个纳米片由相对转 动不同角度的平行薄片(几层到十几层厚度)为结构基元堆叠而成。在单轴压缩下,这种陶瓷的断裂应 变达到14%,永久塑性变形能力高达8%,并且强度相较于传统层状六方氮化硼陶瓷也获得了大幅提升, 打破了结构材料强度和塑性难以兼顾的传统认知。转角层状氮化硼陶瓷的成功研制不仅首次实现了陶瓷 块材的室温高塑性,也为其他层状材料体系的塑性研究提供了启示。此外,转角层状氮化硼陶瓷还具有 高的能量吸收能力和抗疲劳特性,具有重要的应用前景。

厘米级尺寸多晶金刚石透明陶瓷块体的高温高压制备及表征

张佳威 1,2、贺端威 1,*

 四川大学原子与分子物理研究所
宁波东方理工大学(暂名)物理学院 Email: duanweihe@scu.edu.cn

摘要:

金刚石兼具优异的光学、热学与机械性能,使其成为极端环境下透明陶瓷应用的理想之选。透明金 刚石陶瓷可通过化学气相沉积和高压高温下将非金刚石碳前驱体直接转化制得。然而,大规模生产高机 械强度的透明金刚石陶瓷仍是重大挑战。本工作以金刚石粉末为原料成功制备出了厘米级尺寸的多晶金 刚石透明陶瓷块体,其在 400-1600nm 可见光波长范围内的透射率高达约 60%。不同条件下烧结样品的 相组成、残余应力及微观结构演变分析结果表明:在 16 GPa下,2000℃以上的高温可以促进金刚石晶 粒塑性变形,实现致密化烧结和晶粒间的强键合。本工作还定性分析了高温高压烧结过程中石墨化、塑 性变形及石墨逆相变为金刚石的热力学与动力学机制。此外,通过优化金刚石初始粉料的粒度分布以降 低烧结过程中样品内部的非均匀应力分布,我们成功将烧结压力从 16 GPa 降至 10 GPa。这一突破为相 关研究与工业应用开辟了新途径、提供了新机遇。



Transparent diamond ceramics (TDC) from diamond powder

关键词: 金刚石,透明陶瓷,超硬材料,高温高压, 参考文献

1. Jiawei Zhang, Guodong (David) Zhan, Duanwei He, et al. Transparent diamond ceramics from diamond powder, Journal of the European Ceramic Society, 2023, 43: 853-861.

Defect-mediated hard and superhard solids

王善民*, 顾超, 周雪峰, 韩云霞

南方科技大学物理系, 深圳 523803 Email: wangsm@sustech.edu.cn

摘要:

本报告聚焦于通过高温高压技术合成新型缺陷调控硬质与超硬材料,系统研究原子尺度缺陷对钨基 氮化物/硼化物及立方氮化硼的结构稳定性与力学性能强化机制。针对传统超硬材料强韧性难以协同提 升的瓶颈,提出相关的策略,通过调控点缺陷、位错与晶界等微观缺陷,实现材料力学性能的定向优化。 本研究为缺陷介导的硬或超硬材料性能调控建立理论-实验桥梁,所发展的缺陷工程策略在极端环境涂 层、量子传感基体等领域展现出重要应用潜力。

含系综 NV 色心的单晶金刚石的高温高压制备与表征

杨娇、王海阔

浙江大学先进技术研究院 Email: haikuo.wang@zju.edu.cn

摘要:

金刚石中的氮-空位(NV)色心因其室温下长自旋相干时间和光学稳定性在量子信息科学、精密测量和量子传感等领域备受关注。作为金刚石中的一种稳定缺陷,NV色心由金刚石晶格中的置换氮原子(Ns: C 心或 P1 心)和相邻空位组成。因此,金刚石中的氮是形成 NV 色心的先决条件。如何在低氮浓度金刚石中实现高浓度、高均匀性以及保持优异相干特性的 NV 色心系综的制备成为目前需解决的关键科学问题。本研究单晶金刚石通过高压高温(HPHT)技术在 1400 °C、5.5 GPa 条件下合成,通过调整加入的增氮剂或除氮剂含量而实现对单晶金刚石中的氮浓度的控制。此外,通过优化 HPHT 退火参数,在保持单晶金刚石优异结晶质量的同时,有效促进氮原子与电子辐照产生的空位结合,实现 NV 色心的可控制备。光致发光(PL)光谱和光探测磁共振(ODMR)测试结果表明,HPHT 技术制备的 NV 色心浓度约 1.4 ppm,退相干时间 *T*₂*达到约 1.1 μs。该研究所获得的 NV 色心系综在量子传感、量子计算等领域具有重要应用价值,HPHT 技术有望成为未来规模化制备高性能 NV 色心器件的主流方法。

关键词: 单晶金刚石; NV 色心; 高温高压

专题代号: G

预应力存储 B₄C 复合材料的高韧性研究

王晓楠、荣凯旋、王殿振、由存、马率领、王飞、<u>陶强*</u>、朱品文* 吉林大学,高压与超硬材料全国重点实验室,综合极端条件高压科学中心,物理学院 Email: zhupw@jlu.edu.cn, qiangtao@jlu.edu.cn

摘要:

B₄C 是力学性质仅次于立方氮化硼的高硬度(35 GPa)、高耐磨材料,是可应用于深海、深空、深地等极端环境下的特种材料^[1-2]。然而,B₄C 中高强度的共价键使其表现出极高的脆性(2 MPa·m^{0.5}),限制了其广泛应用。利用金属材料的本征延展性,在B₄C 中复合金属、合金等,已经实现了B₄C 材料的韧性提高。然而,金属材料的力学性能较差,往往导致B₄C 金属复合材料的硬度大幅度降低,在硬度不低于 30 GPa 时,其断裂韧性往往难以突破 6 MPa·m^{0.5}。B₄C 复合材料中,拔出增韧机制是实现韧性提高的重要机制。决定拔出增韧效果的关键在于B₄C 与被复合材料之间的相互作用强弱。但是,由于B₄C 本征的表面化学惰性,难以实现B₄C 与被复合材料之间的强共格链接。如何增强B₄C 复合材料的拔出增韧机制,是同时实现高硬度和高韧性的关键科学问题。

本工作,利用低维中空纳米碳材料(富勒烯(C₆₀,零维(0D))、单壁碳纳米管束(SWNTb,一维(1D))、氧化石墨烯(GO,二维(2D)))作为 B₄C 的被复合材料。通过高温高压方法实现预应力储存,有效增强了 B₄C 与被复合材料间的相互作用强度,最终增强了断裂时的拔出增韧效果。随着被复合材料维度的增加,高温高压后分别在 C₆₀、 SWNTb、GO 中预存储了 1.1 GPa, 2 GPa, 3.3 GPa 的内应力,最终在硬度高于 30 GPa 时,断裂韧性分别达到了 7.3 MPa·m^{0.5}, 8.3 MPa·m^{0.5}, 8.6 MPa·m^{0.5}。突破了 B₄C 复合材料在高硬度 30 GPa 下的断裂韧性极限(6 MPa·m^{0.5})。此工作在 B₄C 复合材料中利用预应力储存,同时实现了高硬度和高韧性,也对未来开发超硬高韧材料提供了新视野。





关键词: B₄C,高温高压,韧性,高硬度,碳纳米材料 参考文献

- 1. M. Mashhadi, E. Taheri-Nassaj, V.M. Sglavo, Ceram. Int. 36 (1) (2010) 151–159.
- 2. V. Domnich, S. Reynaud, R.A. Haber, et al., J. Am. Ceram. Soc. 94 (11) (2011) 3605–3628.

"亚稳态"新型金刚石的高温高压合成

唐虎^{1,#,*}, 袁晓红¹, 潘越¹, 胡阔¹, 刘兆东¹, Howard Sheng², 缑慧阳³, 刘

冰冰1

¹综合极端条件高压科学中心,高压与超硬材料全国重点实验室,吉林大学,中国 ²Department of Physics and Astronomy, George Mason University, USA ³北京高压科学研究中心,中国

*Email: hutang@jlu.edu.cn

金刚石是指含有完全 *sp*³ 键合的碳材料。被大家所熟知的立方金刚石具有超高的硬度、热导率等优 异特点,被广泛地应用于加工和信息科学等领域。在过去的数十年里,大量的理论研究提出了上百种新 型 *sp*³ 碳结构,但缺乏实验验证。制约实验上合成新型金刚石材料的根本是热力学限制。理论和实验均 证实在相当宽压力范围内立方金刚石是唯一的热力学稳定的 *sp*³ 碳^[1]。因此,通过动力学控制(前驱物 形态和温压条件)是实现"亚稳态"新型金刚石的关键。

在此,报告人将介绍两种新形"亚稳态"金刚石材料的高温高压合成:

1、一种中程有序的无序金刚石——次晶态金刚石的合成[2]

以 C₆₀为前驱物,在 30 GPa-1600 K 极端条件下合成了次晶态金刚石。该材料突破了传统连续随机网络 模型(CRN)的局限,展现出包含高体积分数次晶体的独特结构特征。据此,我们提出了次晶态的无序材 料结构模型:含有高体积分数次晶体的无序固体材料,次晶体是高度结构扭曲的、中程有序的类晶体团 簇。近期我们通过新的高温高压技术成功将次晶态金刚石的合成压力从 30 GPa 降低至 16 GPa,为工业 化应用奠定了基础。

2、六方金刚石的合成^[3]

六方密排结构的金刚石在上个世纪 60 年代被提出^[4]并被预测具有超过立方金刚石的硬度^[5]。过去数 十年国内外研究者进行了大量的实验均无法制备纯相六方金刚石块体,以至于六方金刚石的存在受到了 广泛的质疑^[6]。我们以高定向石墨作为原料,通过精准调控压力、温度和前驱物形态在 20 GPa-1500 ℃ 条件下成功制备出了毫米级的纯相六方金刚石并系统阐明了石墨相变过程的动力学路径依赖机制,为新 型超硬材料开发提供了理论依据和实验范式。

我们的研究通过创新性实验设计突破了金刚石合成的传统热力学限制,建立了动力学控制策略不仅为新 型碳材料合成开辟了新途径,还对极端条件下材料制备具有普适性指导意义。

关键词:碳材料;次晶态金刚石;六方金刚石;高温高压;亚稳态

参考文献

[1] Lazicki, A. et al. Metastability of diamond ramp-compressed to 2 terapascals. Nature 589, 532–535 (2021).

[2] H. Tang, et al. Synthesis of paracrystalline diamond. Nature 599 (2021), 605–610.

[3] X. Yuan, et al. Direct Synthesis of Millimeter-Sized Hexagonal Diamond from Graphite. Science. Bulletin. (accepted 2025)

[4] Ergun, S. & Alexander, L. E. Crystalline forms of carbon: A possible hexagonal polymorph of diamond. Nature 195, 765–767 (1962).

[5] Pan, Z., Sun, H., Zhang, Y. & Chen, C. Harder than diamond: Superior indentation strength of wurtzite BN and lonsdaleite. Phys. Rev. Lett. 102, 1–4 (2009).

[6] Nemeth, P. et al. Lonsdaleite is faulted and twinned cubic diamond and does not exist as a discrete material. Nat. Commun. 5, 1-5 (2014).
硼基轻元素超硬材料的孪晶结构设计与力学性质研究

<u>宋贤齐</u>、闵楠、李全

吉林大学物理学院 Email: sxq@calypso.cn; liquan777@jlu.edu.cn

摘要:

寻找综合性能优异的新型超硬材料是领域内重要的科学和技术目标之一。纳米孪晶化是提升硬质材 料硬度及多项综合性能的有效手段。研究人员普遍认为,引入空位、位错或晶界等缺陷会导致晶格畸变, 造成晶体平移对称性、成键对称性破缺,进而提高晶体的能量。然而,在由复杂结构单元组成的晶体中 可能会出现例外情况。在这类晶体中,结构单元内部和结构单元之间均具有复杂多样的成键模式,使晶 体内部可能存在难以释放的应变。孪晶化为调控这类晶体的内禀应变和力学性能,设计新型低能超硬材 料开辟了一条新途径。

本工作选取重要的候选超硬材料二十面体笼型富硼固体B_nX(X=B, C, N, O)和类金刚石三元超硬材 料BC₂N为研究对象,发展出适用于复杂结构单元的孪晶结构设计方法,采用"调控晶体复杂成键网络 中的原生应变"策略,设计出兼备低能量和高硬度的新型孪晶超硬固体。其中,设计的新型孪晶碳化硼 (τ-B₄C)打破了长期以来"基态B₄C是菱方型结构"的传统认知,类似构型的孪晶二十面体笼型硼化 合物B₆O、B₆N和B₁₃CN的能量也分别低于其菱方相;设计的γ*-B是首次提出的γ-B₂₈孪晶结构,也是当 前理论硬度最高的孪晶硼结构。此外,利用孪晶界面成键改变晶体化学键比例和结构内禀应变,发现力 学性质优异的新型三元化合物孪晶τ-BC₂N结构。当前研究展示了在此类复杂共价键晶体中孪晶诱导的 晶体稳定机制,丰富了含缺陷晶体的构效关系,为高性能超硬材料的结构设计和制备提供了新思路。



图 1 新型 B₄C 孪晶结构与能量

关键词: 孪晶结构; 超硬材料; 力学性质 参考文献:

- Xianqi Song, Chang Liu, Quan Li*, Yanming Ma*, and Changfeng Chen*, Intrinsic Dense Twinning via Release of Native Strain, Acta Mater. 257, 119151 (2023).
- Nan Min, Hui Liang, Hao Chen, Xianqi Song*, Dan Zhou*, and Quan Li*, Theoretical design of superhard twinned BC₂N, Scr. Mater. 240, 115843 (2024).
- Nan Min, Di Wang, Zikai Liu, Xianqi Song*, Xing Meng*, and Quan Li*, Theoretical Design of Strengthened Nanotwinned γ*-Boron, J. Phys. Chem. Lett. 15, 2904 (2024).

B₆O 体系陶瓷强韧化研究

刘超、应盼等

江西理工大学,南京理工大学 Email: liuchao198967@126.com

摘要:

超硬陶瓷本征断裂韧性低,加工过程中易受应力作用下发生灾难性破坏。因此,研发兼具超硬和 高韧性能陶瓷具有重大意义。团队(工作1)系统研究了6GPa高压烧结B₆O陶瓷的致密化行为、微观 结构和力学性能,采用高压烧结法制备了具有优异力学性能的全致密B₆O陶瓷¹¹。在6GPa压力下, 随着温度从1200℃升高到1700℃,烧结块体的致密性显著增强,1700℃烧结陶瓷孔隙率接近于零, 达到了全致密烧结,实现较高的硬度(H_V: 38.5 GPa, H_N: 45.7 GPa)和良好的断裂韧性(K_{1e}: 4.8 MPa·m¹²)。 (工作2)以B₆O粉和SiC晶须为原料。烧结过程中,一维SiC晶须受应力引发解体并均匀分散于B₆O 基体中(图1)。相较于工作1,通过添加剂引入,最终实现了断裂韧性(K_{1e}: 7.0 MPa·m¹²)的大幅提高^[2]。 此外,团队(工作3)通过高压烧结B₆O和碳黑纳米粉制备了超细晶B₆O一金刚石复合材料^[3]。烧结过 程中,B₆O纳米晶粒内部形成高密度形变孪晶,碳黑相变为纳米金刚石,B₆O晶粒与金刚石晶粒之间形 成高强度共格界面。在25 GPa和1400℃下合成的B₆O一金刚石复合材料的维氏硬度为52 GPa,断裂韧 性为7.2 MPa·m¹²,远远超过了以往报道的B₆O一金刚石复合材料(图2)。相较于工作1和2,该研究利 用采用存在高压相变且相变产物具有高力学性能的添加剂,实现了陶瓷硬度和断裂韧性的同步提高。 关键词:B6O陶瓷;致密化;强韧化;高压烧结。



图 1. B₆O-SiC 复合材料的显微组织分析

图 2. 制备 B₆O-金刚石复合材料的力学性能

参考文献:

- [1] Zhang B., Ying Pan, et al., Int. J. Refract. Met. Hard Mater., 2023, 117: 106405.
- [2] Zhang B., Ying Pan, et al., J. Mater. Sci. Technol., 2025, 204: 238-244.
- [3] Liu C., Ying Pan, et al., J. Am. Ceram. Soc., 2023, 106: 2196-2203.

专题代号: G

纳米聚晶金刚石的韧性调控及其导电特性研究

孙贵乾、连敏、赵波、荣凯旋、刘赫天、马孝慈、陶强、<u>朱品文*</u> 吉林大学,高压与超硬材料全国重点实验室,综合极端条件高压科学中心,物理学院 Email: zhupw@jlu.edu.cn

摘要:

赋予金刚石高韧性以及功能特性(导电)一直是超硬多功能材料的研究热点。虽然金刚石是最硬的 材料(HV=80-120 GPa),但是金刚石中强共价键形成的局域电子,以及结构带来的力学各向异性,使 其缺乏导电性能,且易沿着(111)晶面解理而表现出高脆性^[1-3]。纳米聚晶金刚石(NPD)具备力学各 向同性,并且"消除"了解理面,从而展现出较单晶金刚石更高的硬度和韧性。决定 NPD 优异的力学 性质的关键因素来源于晶界;而开发具备导电性特性的 NPD 则需要构筑导电通道。探究晶界密度(纳 米尺寸)和晶界连接形式与 NPD 力学性能之间的内在联系,并在晶界处构筑导电通道,对金刚石的强 韧化和多功能化具有重要意义。

本工作,开展了不同粒径大小 NPD 的制备,发现随着晶粒的增大,断裂模式从沿晶断裂到穿晶断裂的转变过程。并且当沿晶断裂和穿晶断裂混合时,实现了最高断裂韧性: 13 MPa·m^{0.5},同时硬度还能保持在 114 GPa。高韧性来源于两种断裂模式混合出现时,裂痕偏转增多,有效的消耗了裂纹扩散能。此外,在 NPD 中构筑了 Ni 金属导电通道,均匀分布的 Ni 金属导电通道,以及 Ni 与金刚石的共格生长,使其在保持了 80 GPa 高硬度的同时,具备 14 Mpa·m^{0.5} 的高韧性,以及 5.0×10⁵ S/m 的导电特性。本工作探究了 NPD 的高韧性调控以及功能化(导电),对未来开发超硬多功能材料具有重要意义。



图 1 NPD 的硬度与导电性关系图,Ni-NPD 具备极硬特性(>80 GPa)和金属导电性(>10⁵ S/m) 关键词:超硬材料,纳米聚晶金刚石,高温高压,韧性,导电性 参考文献

- 1. Yan, C.; Mao, H., Li, W.; Qian, J.; Zhao, Y.; Hemley, R. Phys. Status. Solidi A 2004, 201: R25–R27.
- 2. Chaudhri, M.; Diam. Relat. Mater. 2020, 109: 108076.
- 3. Irifune, T.; Sumiya, H. Com. Hard. Mater. 2014, 3: 173–191.

静高压与动高压下的金刚石

贺端威

四川大学原子与分子物理研究所

摘要:

中国是超硬材料工业生产大国,金刚石作为典型超硬材料,在目前大腔体动、静高压技术所 能达到的温度压力范围内,其行为特性依然有诸多未解之谜。报告人结合近年来所在课题组的研究成果, 将简要介绍如下内容:1)人造金刚石的历史与现状;2)金刚石在高压下的熔化与石墨化;3)金刚石 的冲击响应特性;4)纯相聚晶金刚石块体的高温高压烧结及物理特性;5)高压下金刚石在过渡金属触 媒中的生长机理。上述内容涉及碳的高温高压相图、人造金刚石高压触媒法生长机理、金刚石在高压下 的弹塑性形变与烧结、以及微结构对金刚石复合材料动态力学响应特性的调控等系列问题。

参考文献:

- Jiawei Zhang, Guodong (David) Zhan*, Duanwei He*, Dong Li, Qian Li, Congcong Du, Qiushi Dai, Fangming Liu, Xiaozhi Yan, Transparent diamond ceramics from diamond powder, *Journal of the European Ceramic Society* 43, 853–861 (2023).
- Linpeng Zheng, Junpu Wang, Qian Li, Jiawei Zhang, Li Zhou, Duanwei He*, Guodong (David) Zhan*, Bodong Li, Abdulwahab Aljohar, High pressure and high temperature treatment of chemical vapor deposited polycrystalline diamond: From opaque to transparent, *Journal of the European Ceramic Society* 43, 3096–3103 (2023).
- Jin Liu, Yongtao Zou, Guodong David Zhan*, Pei Wang, Xiaozhi Yan, Duanwei He*, Liping Wang*, Is the hardness of material harder than diamond reliable? *Journal of Materials Science & Technology* 144 (2023) 111–117.
- Yuanyuan Li, Lu Zhang, Yin Yu, Youjun Zhang, Qiming Wang, Xiuxia Cao, Bo Gan, Xianming Zhou, Chuanmin Meng, Hongliang He, Duanwei He*, Shock response of micro-grained diamond-SiC composite, *Journal of Applied Physics* 130(2), 025902 (2021).
- Junpu Wang, Yuzhu Su, Yi Tian, Xiaojun Xiang, Jiawei Zhang, Shuaiqi Li, Duanwei He*. Porous single-crystal diamond. *Carbon* 183, 259-266 (2021).
- Qiang Li, Guodong Zhan*, Dong Li, Duanwei He*, Timothy Eric Moellendick, Chinthaka P. Gooneratne, Alawi G. Alalsayednassir, Ultrastrong Catalyst-Free Polycrystalline Diamond, *Scientific Reports (SCI REP-UK)* 10(1), 22020 (2020).
- Jin Liu, Guodong Zhan*, Qiang Wang, Xiaozhi Yan, Fangming Liu, Pei Wang, Li Lei, Fang Peng, Zili Kou, and Duanwei He*, Superstrong micr-grained polycrystalline compact through work hardening under high pressure, *Appl. Phys. Lett.* 112, 061901 (2018).

天然金刚石成因机制猜想

贾晓鹏

高压与超硬材料全国重点实验室,吉林大学物理学院,长春130012 Email: jiaxp@jlu.edu.cn

摘要:

金刚石因其独特的晶体结构使其成为集多种优异性能于一体的极限性超硬多功能材料,广泛应用于 工业、科技和国防等领域。金刚石和石墨是碳的同素异构体,石墨是低压稳定相,金刚石是高压稳定相。 金刚石的主流合成方法分为高温高压法和 CVD 法。天然金刚石形成于地球内部高温高压环境,但其形 貌特征和晶体内部的杂质行为等与高温高压人工合成的晶体存在巨大差异,其成因机制尚有争议。本报 告将基于高温高压下金属触媒溶剂-碳素体系合成的金刚石与天然金刚石的形貌特征,从金刚石的晶体 生长、晶面特征和生长驱动力等角度提出天然金刚石的成因机制猜想,为进一步人工合成特种金刚石单 晶提供创新思路。

关键词: 高温高压, 天然金刚石, 人工合成金刚石, 生长驱动力

本工作得到了国家自然科学基金(12374006)和吉林省自然科学基金 (SKL202302007)支持。

无粘结剂碳化钨及其复合材料的高压制备

马梦冬

燕山大学

mamengdong@ysu.edu.cn

碳化钨(WC)基硬质合金作为金属陶瓷复合材料的典型代表,在矿山开采、石油钻 探和先进制造等领域具有广泛的应用。WC 基硬质合金常采用钴(Co)促进烧结同时提升 其强度和韧性,而 Co的存在往往会导致其硬度降低。因此如何实现 WC 基硬质合金的硬 度、强度和韧性的协同提升仍然是制约 WC 基硬质合金进一步发展和应用的重要科学问题。 本研究突破传统粘结剂体系限制,基于细晶强化原理,采用高压高温烧结技术制备出平均 晶粒 103 nm 的无粘结剂纳米 WC 陶瓷,其室温下的维氏硬度和断裂韧性分别为 29.7 GPa 和 6.3 MPa·m^{1/2}。在 1000 °C 高温下仍保持 23.4 GPa 的维氏硬度,降幅仅 22%,其高温硬 度显著优于 WC-Co 硬质合金以及碳化硅、氮化硅和氧化铝等典型结构陶瓷。微观分析表 明纳米晶粒内高密度位错、低能Σ2晶界以及材料低热膨胀系数的多重作用提升了纳米聚晶 WC 的力学性能。在此研究基础上,通过碳化硅晶须在高压烧结过程中的原位断裂,成功 在 WC 基体中引入均匀分散的碳化硅纳米棒(SiCr) 增强相。当 SiCr添加量为 5 wt.%时, WC-SiCr复合材料表现出优异的综合性能,其室温维氏硬度、高温(1000°C)维氏硬度、 断裂韧性和抗折强度较无粘结剂纳米聚晶 WC 均有明显提高。在 Inconel 718 合金切削试验 中,相比于无粘结剂纳米聚晶 WC 刀具,复合材料刀具寿命和加工表面精度均有显著提升。 WC-SiCr复合材料通过高压诱导 WC 塑性变形的方式在 SiCr中引入微观应力。在裂纹扩展 过程中,SiCr中的应力释放,产生多重微裂纹消耗裂纹扩展能,从而实现韧性的进一步提 升。这一研究为开发新一代硬质合金材料提供了重要的科学理论和技术源头,对推动硬质 合金产业技术升级具有重要科学价值与工程意义。

387

镍锰钴触媒变压条件下金刚石大单晶的生长行为研究

赵洪宇, 马红安, 贾晓鹏

高压与超硬材料全国重点实验室,吉林大学物理学院,长春130012

Email: hongyuzhao98@163.com

摘要: 镍锰钴合金是我国自行研制的优质金属触媒,具有金刚石合成条件低,易于控制等 优点。在温差法合成金刚石大单晶时,低压条件下晶体具有(100)生长区间宽的形貌特征, 但随着合成温度的升高,晶体质量严重劣化,变为以(111)晶型为主导的塔晶、且晶体内 部出现大量串珠状包裹体。本研究发现在更高的合成压力条件下,采用镍锰钴触媒合成的 晶体质量将不再随合成温度的改变出现劣化,合成出晶型良好且内部无金属包裹体的优晶。 本研究将对金属触媒体系合成优质金刚石大单晶提供重要参考,为揭示天然金刚石的成因 机制提供思路。

关键词: 高温高压、镍锰钴触媒、合成压力、金刚石单晶

结合剂成分对聚晶金刚石结构演化的影响

刘咏1*, 王丽1, 邱天旭1, 邓丽芬2

1. 中南大学粉末冶金研究院,湖南长沙

2. 中科院宁波材料研究所,浙江宁波

*Email: yonliu@csu.edu.cn

摘要:

结合剂成分对聚晶金刚石(PCD)材料的微观结构演化与服役性能具有关键性影响。采用高温 高压条件(5-7 GPa,1300~1450 °C)制备 PCD 样品,并结合先进电子显微表征技术,系统研究了 不同结合剂成分(如 Co、CoNiFe、CoNiFe-不同碳化物复合体系及多主元 CoNiFeCrTiZrAl 合金体系 等)对 PCD 材料致密化、界面微结构演化与析出相行为的作用机制。结果表明,多主元金属结合剂 具有更低的共晶温度,有利于促进金刚石颗粒间 D-D 键的形成。同时,强碳化物形成元素(如 Ti、 Cr、Zr)的引入可增强 C 在金属熔体的溶解与迁移能力,更有利于二次金刚石颗粒的析出,促进连 续金刚石骨架结构的形成,从而显著提升了 PCD 材料的横向断裂强度。原位 TEM 拉伸测试表明, 所形成的界面微结构可提升粘结相-金刚石的界面结合强度,对改善 PCD 材料宏观断裂韧性具有一 定的贡献。此外,还将介绍高温高压合成过程中金刚石→石墨的相变及金刚石缺陷处(如孪晶界、 位错、晶界等)金属相和碳化物相的析出。以上研究结果可为新型金刚石用结合剂的设计、聚晶金 刚石微结构优化与服役性能提升提供理论依据。

关键词:聚晶金刚石;结合剂成分;界面微结构;金刚石相变;析出

高压下氮掺杂金刚石的合成及 NV 色心调控

<u>李尚升</u>^{1,*},胡强¹,胡美华¹ ¹河南理工大学材料科学与工程学院,河南焦作,454003

*Email: lishsh@hpu.edu.cn

摘要:氮是金刚石中常见的杂质。本报告在 5.6 GPa、1513℃或 1553℃下添加三聚氰胺(C3H6N6) 成功合成了金刚石晶体。随着 C3H6N6含量的增加,金刚石的颜色从黄色变为绿色,金刚石的最高 氮含量为 2300ppm。高合成温度可以有效减少缺陷的形成,并在金刚石生长过程中 C 中心的形成 中发挥关键作用。令人惊讶的是,当 C3H6N6含量为 0.1 重量%时,金刚石很可能会生长成双晶。 在金刚石生长过程中,C3H6N6的碳原子很可能作为碳源形成平面位错,最终导致孪晶金刚石的形 成。退火是改变金刚石中氮状态的重要方法。本研究将上述所合成的 C3H6N 掺杂的高氮含量金刚 石进行高压高温退火。退火使高氮金刚石的透明度提高,含氮金刚石表面的金字塔形缺陷消失或 被破坏。红外光谱显示,退火导致高氮金刚石中一些氮的聚集状态从 C 中心变化到 A 中心。拉曼 光谱光谱表明,氮含量越高,特征峰位移越大,金刚石的半峰全宽(FWHM)越宽。退火对其位 置和半高宽的影响很小。PL 光谱表明,适当的氮浓度有利于提高 NV⁻金刚石。



图1 不同温度下不同C₃H₆N₆添加量所合成的金刚石 (d) 0.15wt%, (f) 0.25 wt% at 1513 K; (d') 0.15 wt%, (f') 0.25 wt% at 1553 K^[1]





关键词: 高温高压; 金刚石单晶; 磷掺杂; 半导体性能

参考文献

Junzhuo Wang, Shangsheng Li*, Meihua Hu, Taichao Su, et al., C₃H₆N₆ doping effect of synthetic diamond under high pressure and high temperature [J], International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2020, 87: 105150(1-7).
Yuan Nie, Shangsheng Li*, Qiang Hu, Junzhuo Wan, Meihua Hu, et al., Effects of high pressure and high temperature annealing on the characteristics of HPHT diamonds with high nitrogen content [J], Optical Materials. 2023, 137: 113538.

高导电高硬度高熵十二硼化物研究

梁拥成、郑兴伟、张家华、崔建

东华大学物理学院 Email: ycliang@dhu.edu.cn

摘要:高电导与超硬度是最想追求的材料特性,但两者是相互矛盾的,因为要提高硬度,就要抑制材料 位错运动,这不可避免增加可导电子的散射,增加了材料电阻。本文报道一种高熵十二硼化物复合材料, 包含有大量原子尺度自锁层,实现了超高硬度与超高电导特性共存。维氏硬度测量显示它在小载荷 0.49N 条件下它的硬度高达 51.2±3.6GPa,低温电阻测量显示它同时具有拥有超高电导特性,室温电阻 率约为 44.5 μΩ.cm,与纯金属相当。本文揭示其高硬度源自于三维硼原子共价网络与高熵强化效应;同 时,三维硼原子网络充当输运电子的导电通道,且在高熵过程保持完好,提供了它的超高电导特性。此 外,与其它硬的金属化物材料相比,这种高熵十二硼化物具有高浓度、不昂贵的硼原子组分,大大降低 它的原材料成本与密度。本文研究打开了一种获得超高硬度、超高电导、密度轻的、成本可控材料的新 的设计途径,为极端条件下先进电子装置与军工防弹衣等提供新的材料选择。 关键词: 硼化物;高硬度;高电导;高熵材料

非静水应力下超硬材料的结构设计

Tailoring Superhard Materials via Nonhydrostatic Stresses

<u>刘畅</u>

吉林大学 物理学院 物质模拟方法与软件教育部重点实验室 Email: liuchang127@jlu.edu.cn

摘要:

近年来,高压和应变工程研究中日益引入单轴压缩或剪切应变等非静水应力作用,极大地扩展了物质研究的相空间,为创造新物质与探索新物性提供了创新源泉。我们前期的理论研究揭示,金刚石在常压或静水高压环境下为绝缘体,但双轴压缩与剪切共存应力条件可驱使金刚石转变为金属态,甚至变为超导体。这一令人惊讶的发现表明,非静水应力作为一种有效的物性调控手段,能够定性地改变材料性质 [Phys. Rev. Lett. 123, 195504 (2019), Phys. Rev. Lett. 124, 147001 (2020)]。

受到上述工作的启发,我们通过第一性原理应力应变关系模拟,系统研究了在不同非静水应力条件 下过渡金属硼化物的晶体结构与性质演变,提出利用极端工况下普遍存在的非静水应力条件定向设计材 料微结构,抑制实际承载条件下预期损坏模式的发生,从而提升材料力学性质的新材料设计思想。据此, 系统研究了压痕测试、以及摩擦磨损条件下,过渡族金属二硼化物的原子结构、成键与导电电荷分布、 声子振动等的响应行为,发现单轴压缩分量可抑制由剪切分量引入的晶格动力学失稳,依据此机制设计 并制备了晶体取向诱导的二硼化钽超硬金属薄膜材料 [Acta Mater. 286, 120724 (2025), Phys. Rev. B 105, 024105 (2022)]。

关键词: 非静水应力、超硬材料、结构设计

392

功能型硬质材料合成与探索

于晓辉

中国科学院物理研究所, 100190 北京, 中国

过渡金属硼化物作为新一代超硬材料的有力候选体系而备受关注。在过渡金属硼化物中, 因其具备容纳足够电子以形成强硼共价键的能力,从而具有显著力学优势;同时由于过渡金 属 d 电子的引入使得该体系具备一定的功能属性。在本报告中,报告人将介绍最近几年研究 组在该体系取得的进展:如 ZrB₁₂在高力学强度的前提下还表现出可类比于金属铂的导电性, 大大拓展了超硬材料的应用空间,(<u>Adv. Mater. 29, 1604003 2017</u>);具有超硬及宽带半导体 发光特性的 Al_{2.7}B₅₀,这是目前发现的硬度最高的宽带半导体,对于极端环境中的半导体器 件应用具有重要意义(<u>Materials Horizons 9, 748, 2022</u>)。除此之外,课题组也将超硬材料拓 展到三元体系,发现多组元体系的增强效应。

聚晶金刚石与立方氮化硼硬度与耐磨性的关系比较

周礼、贺端威

四川大学原子与分子物理研究所 Email: 13378181477@163.com

摘要:

硬度是衡量刀具材料耐磨性的重要指标。研究硬度对刀具材料耐磨性的影响具有重要的实际应用价值。本实验在高温高压下烧结了一系列不同硬度的聚晶立方氮化硼(PcBN)和金刚石(PCD)致密体,并将这些样品制成车刀,用于花岗岩车削过程中的边缘磨损测试。根据上述测量结果,研究了同等晶粒尺寸(1-2 μm)的两种材料硬度与耐磨性之间的关系。结果表明两种材料的硬度和耐磨性之间存在显著的正相关关系,且两种材料的硬度和耐磨性之间的关系符合同一类型的拟合函数。更值得注意是,随着硬度的增加,两种材料的耐磨性表现出不一致性。具体来说,维氏硬度低于 40 GPa 时,两种材料的耐磨性相当。但维氏硬度高于 40 GPa 时,两种材料的耐磨性存在差异,且这种差异随着硬度的增加而变得更加明显。在维氏硬度为 70 GPa 时,PCD 的磨损率约为 PcBN 的 3.5 倍,预计在更宽的硬度范围内,两者之间的差距将继续扩大。进一步分析表明,晶粒的本征硬度对多晶材料的耐磨性存在显著的影响。



图 1 (a)PcBN 和 PCD 样品的耐磨性比较,(b)同等硬度水平下的磨损率比值,(c)相同磨损率下的维氏硬

度值比值。

关键词: 耐磨性, 维氏硬度, 高温高压, 聚晶立方氮化硼, 聚晶金刚石 参考文献

[1] M. M. Khruschov, Principles of abrasive wear, Wear. 28 (1974) 69-88.

[2] M. A. Moore, The relationship between the abrasive wear resistance, hardness and microstructure of ferritic materials, Wear.
28 (1974) 59-68.

新型纳米孪晶超硬材料的结构设计及物性模拟

<u>李全</u>

吉林大学物理学院 Email: liquan777@jlu.edu.cn

摘要:

本工作选取一类重要的候选超硬材料"二十面体笼型硼化合物"为研究对象,发展出适用包含复杂 结构单元的纳米孪晶结构设计方法,编写了自主知识产权软件,提出了一种孪晶化诱导结构稳定的有趣 机制,设计出多组以致密孪晶为特征的稳定晶体结构。与原始晶体相比,这些纳米孪晶相不仅具有更低 的能量,还显示出更优越的力学性能。例如,菱方相碳化硼(R-B4C)长期被认为是 B4C 的最稳定单晶 结构。基于自主发展的孪晶结构设计方法,采用"释放晶体复杂成键网络中的原生应变"策略,本研究 设计出了一系列能量低于 R-B4C 的纳米孪晶相 B4C 结构。随着缺陷(孪晶)密度的增加,孪晶相的能 量逐渐降低。结果显示,具有最致密周期性的孪晶相 Twin R1 结构是 B4C 的最稳定晶体结构,其理想 剪切强度到达 50 GPa,比 R-B4C 提升约 25%。该现象还在二十面体笼型硼化合物 B6O、B6N 和 B13CN 中出现。当前研究展示了在此类复杂共价键晶体中纳米孪晶诱导的晶体稳定机制,丰富了含缺陷晶体的 构效关系,为新型高性能纳米超硬材料的结构设计和制备提供了新思路。

关键词: 超硬材料, 孪晶结构, CALYPSO, 物性模拟

参考文献

- Xianqi Song, Chang Liu, Quan Li, Yanming Ma Changfeng Chen, Intrinsic dense twinning via release of native strain", Acta Mater. 257, 119151 (2023).
- Nan Min, Di Wang, Zikai Liu, Xianqi Song, Xing Meng, and Quan Li, Theoretical Design of Strengthened Nanotwinned γ*-Boron, J. Phys. Chem. Lett., 15, 2904–2910 (2024).
- 112. Nan Min, Hui Liang, Hao Chen, Xianqi Song, Dan Zhou, and Quan Li, Theoretical design of superhard twinned BC₂N, Scripta Mater. 240, 115843 (2024).

Sc-Ta-B 化合物结构设计、实验制备与物性研究

翟航^{1,2,} 于晓辉², 李全¹

¹吉林大学物理学院, 长春 130012, 中国 ²中国科学院物理研究所, 100190 北京, 中国 Email: zhaihang@jlu.edu.cn (Times New Roman 五号字)

超硬材料在耐磨损、抗腐蚀等方面具有优异的性质,被广泛应用于高压产生装置、机械制造、切割 刀具等科研以及工业用途。金刚石和立方氮化硼作为传统的超硬材料,具有很高的硬度(45-160 GPa), 已被用来满足工业上大部分需求,但其应用仍然存在一定限制。例如,金刚石热稳定性差,立方氮化硼 需要在高温高压极端环境制备,生产成本高。此外,这些强共价键的化合物在常压下不具有导电属性, 功能性单一。因此,寻找兼备高硬度,生产成本低并且综合性能突出的新型超硬材料一直是凝聚态物理 和材料科学领域的焦点问题

过渡金属硼化物作为新一代超硬材料的有力候选体系而备受关注。在过渡金属硼化物中,过渡金属 二硼化物(TMB₂)因具备容纳足够电子以形成强硼共价键的能力,从而具有显著力学优势。在此,选择 维氏硬度较高的二硼化钽(TaB₂)(约 26 GPa)作为基体材料,由于钪原子半径(1.41 Å,电子构型 3*p*⁶4*s*²3*d*)与钽(原子半径 1.34 Å,电子构型 5*p*⁶6*s*²5*d*)在原子半径和价电子方面存在显著差异,故选 择钪作为替代元素。通过多组分策略设计了Sc_sTa_{1-s}B₂(*x* = 0.0–1.0)的三元过渡金属硼化物。所得结 果显示,这些同构化合物的键能态占据情况的差异会对力学性能产生显著影响。其中Sc_{0.5}Ta_{0.5}B₂的费米 能级(E_r)处于赝能隙内,由于其电子态局域化程度最高,展现出最好的稳定性以及力学强度。值得注 意的是,我们成功合成了 Sc_{0.5}Ta_{0.5}B₂,其在室温下的硬度达到了31.5 GPa,是单相过渡金属硼化物的硬 度最高值。当前研究成果为通过多组分策略诱导电子能级填充来设计新型超硬材料提供关键见解。此外, 这种方法挖掘了开发低成本的过渡金属二硼化物作为超硬材料的潜力。



图1 Sc_{0.5}Ta_{0.5}B₂的硬度测试结果

关键词: 超硬材料, 过渡金属硼化物, 第一性原理计算

通过高压热扩散实现高电离效率的掺磷 n 型金刚石

董卫国19、贺端威1,2*

1. 四川大学原子与分子物理研究所

2. 四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室

♀此项工作作者排名:郭睿昂、董卫国、贺端威

*E-mail: duanweihe@scu.edu.cn

摘要:

金刚石材料具有宽禁带、高热导率、高载流子迁移率、高击穿电场强度和良好的抗辐射特性等优点, 被誉为终极半导体材料。制备出的电子器件在高温、高频、大功率、抗辐射等方面拥有极大的优势。虽 然基于 p 型硼(B)掺杂金刚石和氢(H)终端金刚石已经可以成功制备出金刚石基电子器件,但是 n 型半导体金刚石的制备技术瓶颈仍然制约着金刚石基电子器件的发展。金刚石 n 型掺杂困难和 n 型金刚 石电学性能较差等问题一直难以解决。在众多的 n 型掺杂剂中,磷(P)元素被认为是金刚石中最有效 的 n 型掺杂剂,其具有较低的施主能级和较高的溶解度吸引着众多科技工作者的目光。然而,相对于金 刚石中的碳(C)原子,P原子较大的原子体积给其在金刚石中的掺杂带来了巨大挑战。例如,利用高 温高压(HPHT)生长过程中的掺杂方法,很难获得可用的 P 杂质浓度;利用化学气相沉积(CVD)法 或离子注入法获得的 P 掺杂金刚石,虽然可以获得高浓度的 P 掺杂,然而其较差的电学性能并不能满 足实际的应用需求。为此,本论文工作提出了一种在压力条件下的扩散掺杂方法。该方法通过高压来对 P 原子的体积大小进行调控,并利用高温将 P 原子逐渐扩散到金刚石晶体中。

实验发现,在 15 GPa 的压力条件下,当扩散温度大于 1500 ℃时,可以成功制备出 n型 P 掺杂金 刚石半导体。获得的金刚石样品在拉曼光谱、紫外-可见吸收光谱的测试结果中均展现出高浓度的 P 掺杂 杂特性。在 15 GPa 和 1600 ℃条件下制备出的 P 掺杂金刚石具有较高的 P 原子浓度(~10²⁰ cm⁻³),且 掺杂深度最大可达~780 nm,可以满足 P 掺杂金刚石在电子器件领域中的使用要求。在 15 GPa 和 1600 ℃ 条件下获得的 P 掺杂金刚石很容易电离,其激活能仅为 102 meV。具体表现在 P 原子浓度~10²⁰ cm⁻³,接近目前报道的 P 掺杂金刚石中的最大掺杂浓度;室温电子浓度可以达到~10¹⁸ cm⁻³,比目前报道的 P 掺杂金刚石提高 2 个数量级;室温电阻率仅为 2 Ω·cm,低于目前 P 掺杂金刚石中报道的最小值。

关键词: 金刚石; 磷掺杂; n 型半导体; 高压热扩散; 高温高压; 电离效率

专题代号: G

碳化硼(B4C)室温延展性研究进展

李鹏辉、李君、宁守琮、罗坤、安琪、聂安民、田永君

燕山大学材料学院高压科学中心

Email: ysulph@163.com

摘要:

陶瓷晶体碳化硼(B4C)因其优异的硬度、低密度和高熔点,广泛应用于防弹装甲和工程领域。然而,B4C 作为强共价材料通常表现为脆性,尤其在室温下的延展性差,限制了其在需要韧性和抗冲击性的应用中的发展。通过四维扫描透射电子成像技术(4D-STEM)和原子模拟,本研究发现B4C 晶体中的碳-空位-碳链结构在塑性变形中发挥重要作用。硼原子缺失产生的空位显著改变晶格局部结构,诱导碳-碳键形成并导致局部非晶化,从而实现塑性变形。原位拉伸测试显示,B4C 样品在超过弹性极限后,展现出 31.2%的断裂应变和 26.8%的延展性,远超以往对共价材料的预期。

此外,研究还表明,随着样品尺寸的减小(厚度小于100纳米),B4C的断裂应变和强度显著提高,表明尺寸效应在B4C的塑性变形中起到了重要作用。这一发现为B4C材料的进一步应用开辟了新方向,特别是在高韧性和抗冲击性需求的领域,如航空航天和防护装甲。同时,研究中发现的"空位诱导非晶化"机制,可能适用于其他强共价材料(如氮化硼、碳化硅等),为提升这些材料的塑性和韧性提供了理论指导。



图 1 通过 4D-STEM 成像技术对 B4C 晶体原子结构及硼空位的精确表征

参考文献

1. Li Penghui et al. Unveiling high ductility in boron carbide crystal at room temperature, Science Advances, 11, 15, 2025, eadr4648.

微米金刚石的氧化和石墨化:从真空到高压的研究

李倩1、贺端威1,2*

四川大学原子与分子物理研究所
四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室
*E-mail: duanweihe@scu.edu.cn

摘要:

金刚石的氧化和石墨化对其应用至关重要。然而,关于氧化和相变的顺序以及非金刚石相形成的温 度范围,存在相互矛盾的报道。此外,受当时微细粉末制备技术的限制,样品中的催化剂夹杂物等杂质 难以去除,这影响了其固有热稳定性的测定。本研究系统地研究了微米级金刚石粉末在真空、空气和高 压环境中热处理后的氧化和石墨化行为。结果表明:(1)当在空气中退火时,随着温度的升高,金刚石 粉末先氧化然后再石墨化,而石墨化的金刚石则也会被氧化;(2)金刚石粉末在空气中约 669 ℃ 时发 生显著氧化,在空气中约 728 ℃ 和真空中约 1300 ℃ 时转化为石墨,氧气显著促进金刚石的石墨化;(3) 在高压下,由于金刚石晶粒之间的应力分布不均,在低应力区域(低压和高温环境)容易发生金刚石的 石墨化行为。例如,在 5 GPa 的准静水压条件下,石墨化的起始温度约为 1600 ℃,比非静水压条件下 的石墨化温度高约 300 ℃;(4)在相同的压力条件下,比表面积增大(粒径减小),温度升高以及加热 时间延长会加剧金刚石的热不稳定性。

本研究有助于我们系统地了解微米金刚石从真空到高压下的热稳定性,以及金刚石/石墨相变的机 理和动态过程。它可以减少或避免氧化和石墨化对含金刚石材料制备的影响,为金刚石及其复合材料的 生产和应用提供数据参考和理论指导。

关键词: 金刚石; 氧化; 石墨化; 热稳定性; 高温高压

参考文献:

- Qian Li *et al.*, Effect of stress state on graphitization behavior of diamond under high. *Diamond and Related Materials*, 128 (2022) 109241.
- 2. F.P. Bundy *et al.*, Diamond-graphite equilibrium line from growth and graphitization of diamond. *The Journal of Chemical Physics*, 35 (1961) 383–391.
- 3. C. Bradac *et al.*, Effect of structure and composition of nanodiamond powders on thermal stability and oxidation kinetics. *Carbon*, 132 (2018) 616-622.

高压相变/反应制备高性能亚微米多晶β-Si₃N₄与 B₄C

侯志强、王海阔

浙江大学能源工程学院

Email: zhiqiang.hou@zju.edu.cn

摘要:

传统多晶陶瓷的制备通常以纳米/亚微米粉末为原料,如何突破纳米/亚微米初始粉末团聚、吸附、 难以分散及传统烧结过程中晶粒长大难题,获得兼具高致密度、清洁界面及优异力学性能的纳米/亚微 米多晶陶瓷,是目前该领域的关键挑战。

高压相变/反应合成法为纳米/亚微米多晶陶瓷的制备提供了新思路:以微晶前驱体为原料通过相变 或反应制备多晶陶瓷形成的新相,因具有清洁界面而具有优异的力学性能。高压不仅能降低新相成核的 临界尺寸、增加成核率还能抑制原子的长程扩散,从而精准调控多晶结构至亚微米甚至纳米尺度。此外, 高压诱导的孪晶或互锁结构(如 L-C 锁),可进一步提高陶瓷材料的硬度与韧性。本研究以微晶α-SigN4 粉末及混合的微晶(原子比 B:C=4:1)粉末为原料,利用高压相变与反应分别制备出具有高致密度、清 洁界面、优异力学性能的亚微米多晶β-SigN4(Hv=20 GPa)及 B4C(Hv=46.3 GPa)块体陶瓷,避免了纳 米/亚微米初始粉末团聚、吸附、难以分散及传统烧结过程中晶粒长大问题,从而发展出一种以微晶粉 末为原料通过高压相变或反应制备高性能亚微米/纳米多晶块体陶瓷的方法,为高性能纳米/亚微米多晶 陶瓷的制备提供了新策略。

关键词:微晶;高压;相变;反应;力学性能

参考文献:

[1] Hou et al, Ceramics International. 2020, 46 (8):12449-12457.

[2] Dong et al, Chinese Journal of High Pressure Physics. 2019, 33(2):24-32.

[3] 全斐斐等, 金刚石与磨料磨具工程. 2019, 39(02):32-36.

[4] 王海阔等, 金刚石与磨料磨具工程. 2018, 38(01):1-6.

专题代号: G

泡沫镍嵌套金刚石制备超硬兼具金属导电性的复合材料

<u>孙贵乾</u>,王飞,刘丹青,朱芊浔,由存,王星淋,陶强*、朱品文* 吉林大学综合极端条件高压科学中心.高压与超硬材料全国重点实验室.物理学

院, 吉林 长春, 130012

Emails: zhupw@jlu.edu.cn, qiangtao@jlu.edu.cn

摘要:

近年来,极硬(>80 GPa)且具有金属导电性的复合材料,因其具备在极端条件下服役的潜在的应用前景受到研究人员广泛关注^{1,2}。然而,这种材料制备极为困难,这源于材料本征键合机制的物理对立:超硬依赖于金刚石型 sp³键的强局域电子网络,而金属导电性需通过 sp²键或金属相的离域电子实现。传统改性策略通过硼掺杂或导电相复合可以调和这一矛盾,但均面临显著性能折损。例如,硼掺杂金刚石(BDD)虽可提升导电性至半导体水平(σ=10²-10³ S/m),却受限于掺杂效率低和活化能壁垒,难以突破至金属导电区间。而金刚石/金属复合材料(如 Co、TiC 掺杂)虽可以将导电性提升至金属量级但硬度较单晶金刚石下降 40%以上。

基于此,本研究提出"有序导电通道+共格相界"的协同设计策略,即采用泡沫镍作为导电通路,并高压诱导金刚石和镍两相形成共格相界。结果表明制备的金刚石/Ni复合材料具备类石榴状结构,具备高硬度(>80 GPa)以及金属量级的导电性(~10⁵ S/m)。高导电性源于Ni-NPD内部三维网状的纳米镍导电通路,确保了电子高效输运(复合材料电导率σ≥10⁵ S/m); 其次,高力学性质源自镍和金刚石之间稳定的共格相界抑制了晶届处的裂纹扩展,同时镍内部的大量应力阻碍了位错运动,两者协同作用使复合材料的硬度高达 89 GPa。本研究通过

三维导电通路设计以及共格相界构 耦合极硬和金属导电性,为后续功 思路。



筑实现了在单一体材料中 能材料的设计提供了新的

图 1 Ni-NPD 复合材料的性质

关键词: Ni-NPD, 高温高压, 高硬度, 金属导电性参考文献:

[1] Xigui Yang, Jinhao Zang, Xingju Zhao et al. PNAS. 2024, 9, e2316580121

[2] Zihe Li, Yujia Wang, Mengdong Ma, et al. Nat. Mater. 2023, 22, 42-49

镍锰钴触媒变压条件下金刚石大单晶的生长行为研究

赵洪宇、马红安、贾晓鹏

高压与超硬材料全国重点实验室, 吉林大学物理学院, 长春 130012 Email: hongyuzhao98@163.com

摘要:

镍锰钴合金是我国自行研制的优质金属触媒,具有金刚石合成条件低,易于控制等优点。在温差法 合成金刚石大单晶时,低压条件下晶体具有(100)生长区间宽的形貌特征,但随着合成温度的升高, 晶体质量严重劣化,变为以(111)晶型为主导的塔晶、且晶体内部出现大量串珠状包裹体。本研究发 现在更高的合成压力条件下,采用镍锰钴触媒合成的晶体质量将不再随合成温度的改变出现劣化,合成 出晶型良好且内部无金属包裹体的优晶。本研究将对金属触媒体系合成优质金刚石大单晶提供重要参 考,为揭示天然金刚石的成因机制提供思路。

关键词: 高温高压, 镍锰钴触媒, 合成压力, 金刚石单晶

本工作得到了国家自然科学基金(12374006)和吉林省自然科学基金 (SKL202302007)支持。

高压高温烧结碳化硅晶须增强高熵(Tio.2Zro.2Hfo.2Nbo.2Tao.2)C 陶瓷 韧性研究

李昊 1. 连敏 1. 马帅领 1*. 崔田 1*

宁波大学物理科学与技术学院高压物理研究院 Email: lhao0224@163.com

摘要:

高熵陶瓷(HECs)因优异的力学性能和高温稳定性成为研究热点,但其固有脆性严重限制工业应用,如何在保持高硬度的同时提升韧性是关键挑战。本研究借助高压高温(HPHT)烧结技术,探索碳化硅晶须(SiCw)对高熵(Tio.2Zro.2Hfo.2Nbo.2Tao.2)C(HEC)复合材料的晶粒生长抑制与韧性增强机制。通过 HPHT 工艺(5 GPa, 2000 °C)制备了 SiCw 含量为 0~40 mol%的 HEC-SiCw 复合材料。结果表明,随 SiCw 含量增加,HEC 晶粒生长受抑制,断裂韧性(KIC)显著提升至峰值 9.4 ± 1.2 MPa•m1/2,较纯 HEC 提高 184%,而维氏硬度稳定在 26 GPa。韧性增强归因于晶粒细化与强晶界强度协同促进的穿晶,沿晶,裂纹偏转混合断裂机制,该机制通过裂纹偏转和晶须拔出有效耗散断裂能,阻碍裂纹扩展。



图 1 GA

关键词: 高压高温烧结; 碳化硅晶须; 高熵陶瓷; 断裂韧性; 晶粒细化 参考文献:

- Wang, Y.; Csanádi, T.; Zhang, H.; Dusza, J.; Reece, M.J.; Zhang, R. Enhanced Hardness in High-Entropy Carbides through Atomic Randomness. Adv. Theory Simul. 2020, 3, 2000111.
- Wang, K.; Chen, L.; Xu, C.; Zhang, W.; Liu, Z.; Wang, Y.; Ouyang, J.; Zhang, X.; Fu, Y.; Zhou, Y. Microstructure and Mechanical Properties of (TiZrNbTaMo)C High-Entropy Ceramic. J. Mater. Sci. Technol. 2020, 39, 99–105.

cBN-hBN-SiCw 复合材料性能优化研究

李光乾,孙磊,邹易通,赵智胜

燕山大学, 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室, 高压科学中心 立方氮化硼(cBN)作为典型超硬材料,凭借其超高硬度(仅次于金刚石)、优异热稳 定性(>1400℃)及卓越耐磨性,已成为现代高端制造领域不可或缺的战略性材料,在精密 机械加工、航空航天部件制造、油气勘探钻头、超硬刀具开发等极端工况场景中发挥关键作 用。然而,当前商业化 PcBN 制品普遍存在晶粒粗化问题(微米级主导),纳米/亚微米级 细晶 PcBN 产品仍面临制备技术瓶颈。鉴于晶粒细化可显著提升 PcBN 的强韧协同效应,本 研究创新性地采用亚微米级 cBN 粉体与 SiCw 为原料,通过高压烧结技术(6 GPa, 1450℃) 成功制备出 cBN-hBN-SiCw 三元复合材料。其中, hBN 通过 cBN 的高温相变原位生成, 形 成独特的亚微米多相复合结构。实验结果表明,当 SiCw 添加量为 25 wt.%时,复合材料展 现出最优综合力学性能: 维氏硬度达 36.5 GPa, 断裂韧性提升至 6.2 MPa·m^{1/2}, 三点抗弯强 度达到 687.4 MPa。这种性能飞跃源于多尺度协同强化机制: (1) hBN 层状结构的层间滑 移有效耗散裂纹扩展能量; (2) SiCw 通过晶须拔出效应与裂纹桥接作用实现增韧: (3) hBN 与 SiCw 在晶界处形成致密交织网络,产生显著的强化效应。值得注意的是,hBN/SiCw 双相添加策略在提升韧性的同时, 未牺牲材料本征硬度, 突破了传统增韧改性导致的硬度下 降困局。针对 PcBN 刀具在高速切削时面临的热-力耦合失效难题,本研究系统考察了复合 材料的高温氧化行为。经1500℃氧化处理后,材料表面形成灰白色 B₂O₃保护层(XRD 证实), 该玻璃态氧化物可有效抑制氧扩散,赋予材料自保护特性。然而,高温诱导的 hBN 相含量 增加(源自残余应力的释放)会弱化界面结合强度,最终导致材料高温失效。这一发现为优 化 PcBN 刀具的热稳定性提供了重要理论依据。

关键词: cBN, SiCw, 高压烧结, 增韧机制

专题代号: G

剪切变形驱动少层石墨烯结构和形貌演化

<u>李朋朋</u>、李晨明、祁墨达、胡文涛、田永君、Alexander V. Soldatov

燕山大学高压科学中心亚稳材料国家重点实验室材料学院 Email: 18730820344@163.com

摘要:

近年来,石墨烯及其衍生物因其独特的物理性质成为材料研究热点,但其在高压与剪切应力耦合作 用下的结构演化机制尚不明确。本研究采用旋转式金刚石对顶砧装置对少层石墨烯(few-layer graphene, FLG)粉末实施预压缩后的剪切加载,结合高分辨透射电镜(HRTEM)和多波长激发拉曼光谱对样品 进行系统表征。实验结果表明:样品不同区域的应力分布呈现显著空间异质性,拉曼光谱映射显示中心 区域结构保持相对完整,而外围区域因剪切主导变形导致缺陷密度显著增加,中间过渡区域的远程有序 石墨烯结构则完全破坏。尤为重要的是,HRTEM分析首次在剪切变形区域观察到与母体石墨烯保持晶 格共格的金刚石纳米畴,这些纳米晶被包裹在无序碳基体中。本研究揭示了剪切应力在 FLG 向纳米金 刚石相变中的关键作用,为理解碳材料在极端应力条件下的结构演变提供了新的实验依据,对开发基于 应力调控的碳同素异形体合成技术具有重要指导意义。

关键词: 石墨烯 纳米金刚石 剪切变形

参考文献

- Levitas, V. I. High-pressure phase transformations under severe plastic deformation by torsion in rotational anvils. *Mater. Trans.* 60, 1294-1301 (2019).
- 2. Ke, F. et al. Synthesis of atomically thin hexagonal diamond with compression. Nano Lett. 20, 5916-5921 (2020).
- 3. Németh, P. et al. Diamond-graphene composite nanostructures. Nano Lett. 20, 3611-3619 (2020).

专题代号: G

碳化铼的高温高压制备及其硬度性质研究

宁云雨、黄晴晴、侯语同、吴林鸿、张哲瑀、陶强*、朱品文* 吉林大学,高压与超硬材料全国重点实验室,综合极端条件高压科学中心,物理学院

Email: zhupw@jlu.edu.cn, qiangtao@jlu.edu.cn

摘要:

铼碳(Re-C)材料在极端环境下具有重要应用潜力,但其高压合成机制与性能调控仍不明确。本研究在 5 GPa 压力下,通过调控温度(1400 - 2000℃)与铼碳比(1:0.3 - 1:1),系统探索了 Re-C 材料的结构演变与力学性能。X 射线衍射(XRD)分析表明: (1)在 5GPa,保温 15min 时,ReC 相的形成的温度阈值为 1600 - 1800℃。高于 1800℃时 ReC 分解为金属铼和碳。低于 1600℃以下时不足以合成 ReC。(2)1400℃和 2000℃下,铼的(100)、(101)等晶面间距显著增大(△d 达+0.018 Å),而(002)晶面因 HCP 结构的 e 轴高对称性保持稳定。(3)碳缺失诱导强化机制:当铼碳比为 1:0.4 时,硬度达峰值(Hv=20.23 GPa),较传统 ReC 提升 14.3%。该现象归因于碳空位引起的晶格畸变与电子局域化,增强 Re-C 键强度。研究提出"空位诱导强化"模型,为超硬材料设计提供了新策略。通过整合高压合成、多尺度表征与计算模拟,本研究为 Re-C 材料在航空航天与核能领域的应用奠定了理论与实验基础。

关键词: Re-C 材料; 高温高压; 空位诱导强化; 缺陷工程

参考文献

1. Liang Y, Cui J, Xiao Y, et al. Vacancy Hardening and Ordering in Rhenium Tungsten Carbides[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2022, 126(36): 15215-15221.

具有优异力学和介电性能的富铌铁矿相 TiO2 纳米陶瓷

<u>石上溪</u>、邹易通、刘兵、孙磊、武英举、张洋、罗坤、赵智胜、田永君 燕山大学高压科学中心,秦皇岛,066004 Email: shishangxi198@126.com

摘要:

二氧化钛(TiO₂)因其稳定的物理化学性质和优良的光学性质及光化学活性,在催化^[1-3]、电子器件^[4,5]和光学涂层等领域有着广阔的应用。获得具有优异力学性能的TiO₂一直是人们追求的目标。然而, 传统的锐钛矿相和金红石相TiO₂硬度相对较低,难以满足需求。通过降低晶粒尺寸可以有效提高TiO₂ 陶瓷的硬度,例如通过将金红石相TiO₂的晶粒尺寸从~500 nm减小到~14 nm,其硬度可以从~6 GPa显 著提高到~10 GPa。若进一步降低晶粒尺寸,由于无法在保证烧结良好的同时保持超细(<10 nm)晶粒, 使得获得更高硬度的TiO₂陶瓷变得十分困难。因此期待通过其它途径(如引入密度更高的高压相)进 一步提高TiO₂的硬度。本研究以粒径为~100 nm的锐钛矿相TiO₂粉体为前驱体,采用高压烧结法制备 了富铌铁矿(高压相)的多相TiO₂纳米陶瓷,其显示出优异力学性能和介电性能。研究表明高压烧结 结合相变可以有效细化样品的晶粒尺寸(~10-30 nm)。在晶粒细化和高压相引入的共同作用下,合成样 品的最高硬度约为12.8 GPa,是普通粗晶TiO₂陶瓷的2.5 倍。同时还显示出较大的介电常数(~8×10³) 和低损耗(~0.2),与金红石相的多晶TiO₂陶瓷相当。这些结果丰富了对富铌铁矿相二氧化钛的认识, 从而为开发新的应用提供了可能。

关键词: TiO2纳米陶瓷; 高压烧结; 力学性能; 介电性能

参考文献

- R. Singh, S. Dutta, A review on H₂ production through photocatalytic reactions using TiO₂/TiO₂-assisted catalysts, Fuel 220 (2018) 607-620.
- 2. X. Chen, L. Liu, F. Huang, Black titanium dioxide (TiO₂) nanomaterials, Chem. Soc. Rev. 44 (2015) 1861-1885.
- Razavi-Khosroshahi H, Edalati K, Hirayama M, et al. Visible-light-driven photocatalytic hydrogen generation on nanosized TiO₂-II stabilized by high-pressure torsion[J]. ACS Catalysis, 2016, 6(8): 5103-5107.
- Tang H, Prasad K, Sanjines R, et al. TiO₂ anatase thin films as gas sensors[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 1995, 26(1-3): 71-75.
- Kirner U, Schierbaum K D, Göpel W, et al. Low and high temperature TiO₂ oxygen sensors[J]. Sensors and Actuators B: Chemical, 1990, 1(1-6): 103-107.

WC-Co 硬质合金的高温高压烧结研究

粟银兴、陈春华、贺端威*

四川大学原子与分子物理研究所 Email: 2061339779@qq.com

摘要:

近年来,针对我国高端硬质合金产品供给不足的产业现状,本研究系统探讨了高压烧结工艺对 WC-6Co硬质合金(YG6)组织与性能的调控机制。采用国产铰链式六面顶压机,在1.0-5.0 GPa范围 内开展高温高压烧结实验,结合X射线衍射(XRD)、扫描电子显微镜(SEM)和维氏硬度测试,分析 不同压力条件下材料的组织演化与性能变化。结果表明,高温高压工艺显著降低了烧结温度并缩短烧结 周期。在5.0 GPa条件下制备的样品获得了显著优化的微观结构,表现为晶粒细化和位错密度升高,维 氏硬度提升至23 GPa,较同成分商用硬质合金提高34.5%。机理分析显示,高压条件增强了烧结过程 中的物质扩散驱动力,加快致密化,同时抑制晶粒长大并诱导位错增殖,形成细晶强化与位错强化的协 同增强效应。本研究为实现硬质合金的高效烧结与性能突破提供了理论依据与工艺参考,具有重要的工 程应用前景。

关键词: 高温高压烧结、硬质合金、六面顶压机、晶粒细化、位错密度、致密化; 参考文献(中文小五号宋体, 其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- Moriyoshi,Y.,Akaishi,M.& Fukunaga,O.The microstructure of WC and WC-4.3 wt% Co sintered at high pressure. J Mater Sci 21,4250–4256 (1986).
- 2. Karimi M M ,Gomes U U ,Oliveira P M , et al.Fracture toughness evaluation of WC-10 wt% Co hardmetal sinte red under high pressure and high temperature[J].High Pressure Research,2016,37(1):59-69.
- 3. 陈开远,全利铭,何颖晗,等.高温高压烧结制备 WC-6Co 硬质合金及其力学性能研究[J].稀有金属与硬质合金,2021,49(0 3):80-86.
- 4. 陈宏洋,彭放,刘平平,等.高温高压烧结高硬度高致密度块体金属钨及钨基合金 W-TiC[J].高压物理学报,2015,29(04):25 5-262.

A feasible route to superhard ternary boride at ambient pressure

ZeFang Wang

Abstract for conference

The matter exhibiting Vickers hardness ≥ 40 GPa are classified superhard material, which has attracted great attention owing to their high resistance to compression and shear deformation. Transition-metal borides (TMBs) are good superhard material candidates due to their relative high Vickers hardness and easy synthesis conditions. The rigid covalent bonding network of boron contribute to great resistance to dislocation movement and plane slippage in crystal lattice. Meanwhile, the transition metal exhibits high bulk moduli which lead to high incompressibility. In recent research, TMBs have been in great interests and numerous hard compounds were successfully synthesized, such as ReB₂, WB₄ and MB₁₂ and their solid solutions. Among this class of materials, WB₄ exhibits excellent mechanical properties to be one of the hardest metal borides. Although the stoichiometric structure of tungsten tetraboride remains unclear, neutron diffraction experiment and subsequent first-principle calculations improved the existence of boron trimers between honeycomb boron layers. This B₁₅ covalent 3D network increases the intrinsic strength of material and thus possesses high hardness and good thermal stability.

The solid solutions from WB_4 possess a slightly enhanced resistance to slippage in boron layers. The solid solutions of metal borides bring nonuniformity into the crystal lattice, thereby enhancing the resistance to dislocation. Moreover, the dopping of different transition metal capable to strengthen the interlayer bonding and stabilize the B_{15} structure. It implies that this type of structure would have greater potential for mechanical properties in a broader ternary TMB system.

In order to explore the upper limit of material hardness in B₁₅ structures, we performed comprehensive calculations in Sc-Zr-B system, using structural prediction software assisted by machine learning psedupotentials. We found a superhard stoichiometric ternary boride Sc₄ZrB₁₅ expected to be synthesized at a hydrostatic pressure above 20 GPa. Moreover, AIMD analysis indicate that its dynamically and mechanically stable monolayer could be synthesized by crystal thin film growth. In view of structure, Sc₄ZrB₁₅ is similar to WB₄ due to the presence of B₁₅ covalent structure, and thus exhibit excellent Vickers hardness of 43 - 51 GPa in pressure condition from 1 atm to 30 GPa. The Zr atoms and relatively distributed boron trimers effectively decrease formational enthalpy, and meanwhile introduce crystal deformation, resulting in a higher shear resistance. Our results reveal that ternary TMBs have great potential of superhard material. We predicted a promising ternary superhard configuration to provide a more diversified platform for mechanical material research.

微纳结构自润滑刀具高压渗透制备与强润协同增强技术研究

张治财、王海阔

浙江大学先进技术研究院 Email: zzc2022@hnu.edu.cn

摘要:

自润滑陶瓷作为先进工具材料,可在极端干切削条件下实现清洁加工。然而,传统自润滑陶瓷刀具 因润滑相与陶瓷基体间的相容性不足,导致机械性能显著降低。同时,力学性能与润滑行为的耦合效应 使得摩擦学机制难以预测。针对上述问题,本研究提出高压渗透与两步制备工艺协同策略:首先构建具 有微纳孔隙结构的 WC/cBN 多孔陶瓷框架以保持基体高硬度,随后通过高压渗透技术实现润滑剂精准 填充。研究表明,润滑相渗透可有效释放界面应力场并诱导增韧效应。结合实验表征与分子动力学模拟, 系统揭示了极端条件下纳米孔内润滑剂渗透动力学机制,剥离了力学-润滑性能耦合关系,解析并建立 了陶瓷润滑颗粒释放模型。摩擦磨损结果表明,该方案使陶瓷刀具的摩擦系数降低了40%,刀具磨损 减少了36%。本方法通过物理隔离策略阻断烧结过程中润滑相与基体的有害反应,实现了力学性能与 润滑特性的独立优化,从根本上解决了传统自润滑陶瓷材料性能相互制约的难题。

关键词: 自润滑陶瓷; 高压渗透; 机械性能; 摩擦磨损; 润滑机制

参考文献

- ZhiCai Zhang, JiaKun Wu, Chao Wang, et al. High-pressure infiltration fabrication of WC-based self-lubricating ceramics with synergistic enhancement of mechanical and lubrication properties. International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2025, 128, 107089.
- ZhiCai Zhang, JiaKun Wu, Chao Wang, et al. High-pressure infiltration fabrication of self-lubricating ceramic tools for dry machining: Mechanistic insights into lubrication behavior and mechanical performance. Journal of Materials Processing Tech. 2025, 339, 118801.
- Jiakun Wu, Zhicai Zhang, Haikuo Wang, et al. High-pressure synthesis of tungsten carbide–cubic boron nitride(WC–cBN) composites: Effect of cBN particle size and volume fraction on their microstructure and properties. International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2023, 110, 106037.

专题代号: G

高强六方氮化硼/碳化硅复合陶瓷的合成与性能

诸葛泽文*、王小雨、霍浪浪、武英举、赵智胜

燕山大学亚稳材料科学与技术国家重点实验室 *Email: zgzw@stumail.ysu.edu.cn

摘要:

六方氮化硼(hBN)陶瓷因其低密度、高化学稳定性、优异绝缘特性及良好可加工性,在工业领域 具有重要应用价值。然而,其较低的机械强度限制了其在某些高负荷场景下的应用。本研究创新性地采 用第二相增强策略,在hBN陶瓷基体中引入碳化硅(SiC)作为增强相,通过优化烧结工艺,成功制备出 新型 hBN/SiC 复合陶瓷。材料性能表征结果显示,该复合材料展现出显著的力学性能提升:其压缩强 度达到 1.22 GPa,硬度提升至 2.34 GPa,较 hBN陶瓷分别提高了约 300%和 210%。这种通过增强相复 合实现性能突破的技术方案,为开发新一代高性能陶瓷基复合材料提供了重要参考,特别在高温结构材 料、极端环境防护等领域展现出广阔应用前景。

关键词:复合陶瓷;hBN/SiC;第二相增强 参考文献

- 1. Wu Y, Zhang Y, Zhang S, et al. The rise of plastic deformation in boron nitride ceramics [J]. Science China Materials, 2020.
- Wu Y, Zhang Y, Wang X, et al. Twisted-layer boron nitride ceramic with high deformability and strength [J]. Nature, 2024, 626(8000): 779–784.

石墨化无序碳-纳米金刚石复合材料:一种兼具优异强度与导电性的 新型材料

邹易通、刘兵、仝柯、赵智胜、田永君

燕山大学高压科学中心,秦皇岛,066004 Email: zyt1000 7@126.com

摘要:

碳-碳复合材料因其优异的力学性能、热稳定性及电学性能,在军工、航天和航空领域备受关注^[1-2]。 传统体系以碳纤维增强热解树脂^[3-6]为主,近年来逐步发展为结合石墨导电性与金刚石力学强度的新型 复合材料。通过调控 sp²杂化碳(如富勒烯、石墨、碳纳米管)的高压相变,可在 15-25 GPa 压力下制 备石墨-金刚石复合材料,其中石墨层间距达 3.0-3.17 Å,并通过共格界面实现纳米级键合。例如,玻璃 碳在 25 GPa 超高压下可形成兼具高强与高导的纳米金刚石-无序石墨复合体。然而,现有合成技术普遍 依赖 12 GPa 以上的高压环境,严重限制规模化应用。降低制备压力并优化界面结构成为该领域突破的 关键方向。本研究通过精准控制纳米金刚石的石墨化转变过程,在工业级可行压力(2 GPa)与中等温 度条件(1200~1400°C)下成功制备出石墨化无序碳-纳米金刚石复合材料^[7]。该材料的微观结构表现 为:纳米金刚石均匀分散于层间距显著大于理想石墨的石墨化无序碳基体中,界面处通过随机分布的 sp²/sp³杂化键形成非规则连接。与传统碳-碳复合材料相比,该材料展现出优异性能:硬度高达 17.5 GPa, 压缩强度达 1.8 GPa,抗折强度达 380 MPa,同时电导率约为 2290 S/m。此项研究为在工业级压力下制 备兼具高强度/高硬度和高导电性的高性能碳-碳复合材料提供了可行方案。 关键词:复合材料;金刚石;石墨化碳;力学性能;电学性能 参考文献

- L.M. Manocha, in: F.G. Caballero (Ed.), Encyclopedia of Materials: Metals and Alloys, Elsevier, Oxford, 2022, pp. 394–419.
- A. Jayakumar, S. Radoor, J.T. Kim, J.-W. Rhim, J. Parameswaranpillai, S. Siengchin, in: S.M. Rangappa, S.M. Doddamani, S. Siengchin, M. Doddamani (Eds.), Lightweight and Sustainable Composite Materials, Woodhead Publishing, 2023, pp. 1–18.
- 3. G. Savage, Carbon-Carbon Composites, Springer Netherlands, Dordrecht, 1993.
- C. Sarathchandran, M.R. Devika, S. Prakash, S. Sujatha, S.A. Ilangovan, in: S. Thomas, C. Sarathchandran, S.A. Ilangovan, J.C. Moreno-Piraján (Eds.), Handbook of Carbon-Based Nanomaterials, Elsevier, 2021, pp. 783–827.
- T. Oku, in: E. Yasuda, M. Inagaki, K. Kaneko, M. Endo, A. Oya, Y. Tanabe (Eds.), Carbon Alloys, Elsevier Science, Oxford, 2003, pp. 523–544.
- 6. S.-J. Park, M.-K. Seo, in: S.-J. Park, M.-K. Seo (Eds.), Interface Science and Technology, Elsevier, 2011, pp. 501-629.
- 7. Z. Li, Y. Wang, M. Ma, H. Ma, W. Hu, X. Zhang, Z. Zhuge, S. Zhang, K. Luo, Y. Gao, L. Sun, A.V. Soldatov, Y. Wu, B. Liu, B. Li, P. Ying, Y. Zhang, B. Xu, J. He, D. Yu, Z. Liu, Z. Zhao, Y. Yue, Y. Tian, X. Li, Nat. Mater. 22 (2023) 42–49

高温高压下矿物岩石电导率的实验研究

<u>代立东*</u>、胡海英

中国科学院地球化学研究所地球内部物质高温高压重点实验室,贵州,贵阳,550081 Email: dailidong@vip.gyig.ac.cn

摘要:高温高压条件下矿物岩石电导率是表征样品电迁移行为的一种重要的研究手段,不仅可用于 合理解译野外地球物理大地电磁测深观测的电学性质异常成因,还可用于深度探究多种材料体系的高压 相结构和相稳定性。

最近,中国科学院地球化学研究所地球内部物质高温高压重点实验室代立东研究员领导的研究团队, 采用多面顶大腔体压力机(YJ-3000t、Kawai-1000t、Walker-1000t等)、金刚石压腔(四柱型、活塞圆 筒型等)、管式冲击波动态加载等高温高压实验设备,有机结合高压电导率、拉曼光谱、CT 三位立体成 像、原子力显微镜、高分辨率透射电镜、高分辨率扫描电镜、多功能质谱、第一性原理理论计算等多种 研究手段,针对橄榄石[1-3]、瓦兹利石[4]、石英[5]、角闪石[6]、绿帘石[7]、单斜辉石[8]、碳酸盐化 榴辉岩[9]、磷灰石[10]、菱铁矿[11]等广泛分布于中下地壳、上地幔、地幔转换带、俯冲带等地球主要 内部圈层的重要矿物岩石,以及三硫化二锑、氧化镉、金红石、二硫化钼、氯化铬等一系列功能材料 [12-21],进行了系统而深入地研究,并取得重要的研究进展。该工作的全面展开,将对系统揭示地球 深部水循环、磷循环、CHO 流体等圈层物质赋存、迁移与演化,以及发现高压下新功能材料 的物性行为具有极其重要的应用和开创性研究意义。

关键词: 高温高压; 物性实验; 谱学实验; 理论计算; 矿物岩石; 功能材料

参考文献

- Dai Lidong, Li Heping, Hu Haiying and Shan Shuangming. Experimental study of grain boundary electrical conductivities of dry synthetic peridotite under high-temperature, high-pressure, and different oxygen fugacity conditions. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2008, 113: B12211, doi: https://doi.org/10.1029/2008JB005820.
- 2. Dai Lidong and Karato Shun-ichiro. High and highly anisotropic electrical conductivity of the asthenosphere due to hydrogen diffusion in olivine. *Earth and Planetary Science Letters*, 2014, 408: 79–86.
- 3. Dai Lidong and Karato Shun-ichiro. Electrical conductivity of Ti-bearing hydrous olivine aggregates at high temperature and high pressure. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2020, 125: e2020JB020309, doi: https://doi.org/10.1029/2020JB020309.
- 4. Dai Lidong and Karato Shun-ichiro. Electrical conductivity of wadsleyite at high temperatures and high pressures. *Earth and Planetary Science Letters*, 2009, 287: 277–283.
- Hu Haiying, Yin Chuanyu, Dai Lidong*, Lai Jinhua, Chen Yiqi, Wang Pengfei, Zhu Jinlong and Han Songbai. The role of α-β quartz transition in fluid storage in crust from the evidence of electrical conductivity. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2024, 129: e2024JB029140, doi: https://doi.org/10.1029/2024JB029140.
- Hu Haiying, Dai Lidong*, Li Heping, Sun Wenqing and Li Baosheng. Effect of dehydrogenation on the electrical conductivity of Fe-bearing amphibole and its implications for the high conductivity anomalies in subduction zones and continental crust. *Earth and Planetary Science Letters*, 2018, 498: 27–37.
- Hu Haiying, Dai Lidong*, Li Heping, Hui Keshi and Sun Wenqing. Influence of dehydration on the electrical conductivity of epidote and implications for high conductivity anomalies in subduction zones. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2017, 122: 2751–2762.

- Sun Wenqing, Dai Lidong*, Li Heping, Hu Haiying, Jiang Jianjun and Wang Mengqi. Electrical conductivity of clinopyroxene-NaCl-H₂O system at high temperatures and pressures: Implications for high-conductivity anomalies in the deep crust and subduction zone. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 2020, 125: e2019JB019093, doi: https://doi.org/10.1029/2019JB019093.
- Jing Chenxin, Hu Haiying*, Dai Lidong, Sun Wenqing, Wang Mengqi and Hu Ziming. Recycled carbonates elevate the electrical conductivity of deeply subducting eclogite in the Earth's interior. *Communications Earth & Environment*, 2023, 4: 276, doi: https://doi.org/10.1038/s43247-023-00936-w.
- Hu Ziming, Dai Lidong*, Hu Haiying*, Sun Wenqing, Wang Mengqi, Jing Chenxin, Yin Chuanyu, Luo Song and Lai Jinhua. Influence of anisotropy on the electrical conductivity of apatite at high temperatures and high pressures. *American Mineralogist*, 2024, 109: 814–826.
- Zhang Xinyu, Dai Lidong*, Hu Haiying, Hong Meiling and Li Chuang. Constraints on the spin-state transition of siderite from laboratory-based Raman spectroscopy and electrical conductivity under high temperature and high pressure. *Geoscience Frontiers*, 2025, 16: 101918, doi: https://doi.org/10.1016/j.gsf.2024.101918.
- Dai Lidong, Liu Kaixiang, Li Heping, Wu Lei, Hu Haiying, Zhuang Yukai, Yang Linfei, Pu Chang and Liu Pengfei. Pressure-induced irreversible metallization with phase transitions of Sb₂S₃. *Physical Review B*, 2018, 97: 024103, doi: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.024103.
- Hong Meiling, Dai Lidong*, Hu Haiying*, Li Chuang, Wu Mingyu and He Yu. Observation of electronic and structural transitions in two-dimensional ferroelastic semiconductor of Nb₂GeTe₄ via pressure manipulation. *Applied Physics Letters*, 2025, 126: 112901, doi: https://doi.org/10.1063/5.0257969.
- Sivakumar Aswathappa, Dai Lidong*, Sahaya Jude Dhas Sathiyadhas, Cathrin Lims Selvakumar and Raju Suresh Kumar. Acoustic shock wave-induced B1 to B2 phase transition of CdO nanoparticles: Structure-property relationship and its mechanism in thermodynamic aspects. *Acta Materialia*, 2025, 286, 120742, https://doi.org/10.1016/j.actamat.2025.120742.
- Hong Meiling, Dai Lidong*, Hu Haiying* and Li Chuang. Structural, ferroelectric and electronic transitions in van der Waals multiferroic material of CuCrP₂S₆ under high temperature and high pressure. *Physical Review B*, 2024, 110: 144103, doi: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.110.144103.
- Hong Meiling, Dai Lidong*, Hu Haiying*, Zhang Xinyu and Li Chuang. Pressure-induced ferroelectric and electronic transitions in two-dimensional ferroelectric semiconductor of NbOCl₂ up to 41.7 GPa. *Applied Physics Letters*, 2024, 124: 112903, doi: https://doi.org/10.1063/5.0194490.
- 17. Hong Meiling, Dai Lidong*, Hu Haiying* and Li Chuang. Structural and electronic phase transitions in three stable tin-sulfur metallic chalcogenides under high pressure. *Inorganic Chemistry*, 2024, 63: 19783–19797.
- 18. Sivakumar Aswathappa, Dai Lidong*, S. Sahaya Jude Dhas, S. A. Martin Britto Dhas, Sourav Laha, Raju Suresh Kumar and Abdulrahman I. Almansour. Acoustic shock wave-induced solid-state fusion of nanoparticles: A case study of the conversion of one-dimensional rod shape into three-dimensional honeycomb nanostructures of CdO for high-performance energy storage materials. *Inorganic Chemistry*, 2024, 63: 576–592.
- Sivakumar Aswathappa, Dai Lidong*, Sathiyadhas Sahaya Jude Dhas, Kumar Raju Suresh and Varadhappa Reddy Mowlika. Acoustic shock wave-induced rutile to anatase phase transition of TiO₂ nanoparticles and exploration of their unconventional thermodynamic structural transition path of crystallization behaviors. *Inorganic Chemistry*, 2024, 63: 17043–17055.
- 20. Hong Meiling, Dai Lidong*, Hu Haiying*, Zhang Xinyu, Li Chuang and He Yu. Pressure-driven structural and electronic transitions in a two-dimensional Janus WSSe crystal. *Inorganic Chemistry*, 2023, 62: 16782–16793.
- Hong Meiling, Dai Lidong*, Hu Haiying*, Zhang Xinyu, Li Chuang and He Yu. Pressure-induced structural phase transition and metallization in CrCl₃ under different hydrostatic environments up to 50.0 GPa. *Inorganic Chemistry*, 2022, 61: 4852–4864.

岩石电各向异性的计算及对地壳熔体和流体的约束

胡海英、罗松、代立东

中国科学院地球化学研究所 Email: huhaiying@vip.gyig.ac.cn

大量的大地电磁测量表明,大陆地壳中、下地壳普遍存在高导电性且具有电各向异性[1-23]。实验电 导率数据表明地壳矿物尽管具有电导率各向异性,且具有晶格优选取向。然而模拟计算表明矿物的电各 向异性在岩石中会显著降低,因此矿物单晶无法解释野外观测到的电各向异^[4]。由此,研究者提出了其 他机制,包括岩性分层、含流体/熔体岩石的定向排列以及石墨化剪切带。然而,由这些机制引起的电 性各向异性难以通过实验进行量化,特别是对熔体或流体定向排列的岩石。在本研究中,我们首次基于 地壳矿物电导率各向异性实验数据和电子背散射衍射(EBSD)数据,利用电路仿真技术计算了由这些 机制引起的岩石电导率各向异性。计算结果表明,岩性分层产生的电性各向异性小于 7.0,而含流体/ 熔体岩石的定向排列可导致更高的电性各向异性,甚至高达 100。对于一些构造活动强烈的地区,如电 性各向异性约为 4.0 的昆仑断裂,根据我们对含熔体层状岩石电性各向异性的计算,推测中、下地壳含 有 7–19 vol.%、含水量为 6–8 wt.% 的熔体。通过我们计算估算的熔体含量与以往基于各向同性电导率 和粘度模型推测的结果基本一致。本研究结果不仅量化了由不同机制引起的电性各向异性,同时提供了 岩石电各向异性的基础数据,可为地球物理学家用于解释观测到的电性各向异性,并约束地壳岩石中流 体或熔体的含量与成分。

关键词: 电各向异性, 地壳, 模拟计算, 晶体优选, 熔体或流体

参考文献(中文小五号宋体,其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

- Le Pape F, Jones AG, Vozar J, Wei W (2012) Penetration of crustal melt beyond the Kunlun Fault into northern Tibet. Nat Geosci 5:330–335. <u>https://doi.org/10.1038/ngeo1449</u>
- McGary RS, Evans RL, Wannamaker PE, Elsenbeck J, Rondenay S (2014) Pathway from subducting slab to surface for melt and fluids beneath Mount Rainier. Nature 511:338–340. <u>https://doi.org/10.1038/nature13493</u>
- Liu Y, Junge A, Yang B, Löwer A, Cembrowski M, Xu Y (2019) Electrically anisotropic crust from three-dimensional magnetotelluric modeling in the Western Junggar, NW China. J Geophys Res Solid Earth 124:9474–9494. <u>https://doi.org/10.1029/2019JB017605</u>
- Simpson F, Tommasi A (2005) Hydrogen diffusivity and electrical anisotropy of a peridotite mantle. Geophys J Int 160:1092–1102. <u>https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2005.02563.x</u>

专题代号: H

水在下地幔顶部的赋存、分部和迁移

刘兆东、陈陆瑶、刘冰冰、许文良

吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室、综合极端条件高压科学中心、地球科学学院 Email: liu_zhaodong@jlu.edu.cn

摘要:

水是影响地球气候、环境和宜居性的重要挥发分,对地球表层地质活动、板块构造和深部动力过程都起着至关重要的作用。水在地球内部的存储一直是地球科学领域的前沿科学问题。现有研究表明地球的上地幔含水量较少(低于100ppm),地幔过渡带至少部分区域是富水的(0.1-1wt%)(Ohtani,2015,2020), 天然超深样品也发现了含水林伍德石、、冰-VII等,更深部的下地幔是地球内部体积和质量最大的圈层, 从地表以下 670 公里一直延伸到 2890 公里,下地幔温压条件极为苛刻,天然样品非常稀少,带来了诸 多挑战,下地幔是否含水,含多少水,如何存储和循环一直悬而未决。下地幔主要名义无水矿物的含水 量的研究强烈依赖于高温高压实验技术的发展。特别是大腔体压机的高温高压实验技术直接决定是否可 以合成大尺寸、高品质的下地幔单晶矿物,能否满足精确的含水量实验分析表征与研究。我们发展适用 于大尺寸单晶矿物合成的大腔体压机超高温高压关键技术,在富水环境下,在17-32 GPa 和 1700-2000 K 合成大尺寸、不含流体包裹体的单晶(Mg,Fe)(Si,Al)O3 布里奇曼石、石榴石、SiO2 斯石英、刚玉和方镁 石,系统的研究这些矿物的含水量随压力和温度的变化关系,发现(Mg,Fe)(Si,Al)O3 布里奇曼石、刚玉 和方镁石是基本不含水的,SiO2 斯石英和石榴石是富水的,当石榴石和斯石英共存时,水会主要进入到 斯石英晶体中;同时,我们合成了新晶体结构的 phase H 固溶体;研究结果进一步表明地幔岩的下地幔 顶部 660-800km 主要是干的,以 Al-SiO2 斯石英斯石英和石榴石为主要成分的大洋玄武岩可以将水带入 下地幔,为理解地球内部水的存储和分布提供重要数据支撑。

关键词:水,下地幔,高温高压,布里奇曼石,石榴石

文献:

1. Luyao Chen, Zhaodong Liu, Xinyu Zhao, Chaowen Xu, Dongyang Ju, Bingtao Feng, Jinze He, Ran Liu, Xinyang Li, Wei Du, Bingbing Liu, Wenliang Xu, Water solubility in nominally anhydrous minerals in a silica-rich system at the top lower mantle, Earth and Planetary Science Letters, 660,119360, 2025.

2. Luyao Chen, Xinyu Zhao, Chaowen Xu, Xin Li, Xinran Zhang, Bingtao Feng, Kuo Hu, Bingbing Liu, Zhaodong Liu, Wenliang Xu, The Role of Pyrope Garnet in Water Transport into the Topmost Lower Mantle, National Science Review, 2025, nwaf133, https://doi.org/10.1093/nsr/nwaf133

专题代号: H

挥发性元素在地球深部的储存

<u>田艺帆^{1,2}</u>、刘寒雨^{1,2,3*}

¹吉林大学物理学院物质模拟方法与软件教育部重点实验室,中国长春,130012 ²吉林大学物理学院超硬材料国家重点实验室,中国长春 130012 ³吉林大学未来科学国际中心,中国长春 130012

百称人子不不什子四小十心,十四人谷 130012

*Email: hanyuliu@jlu.edu.cn 或 lhy@calypso.cn

挥发性元素的研究对于理解地球内部动力学和演化过程起着关键的作用^[1-2]。为了理解这些挥发性 元素的行为,人们常常利用"挥发性趋势"曲线来解释观测到的挥发性元素丰度的缺失^[3]。尽管如此,部 分研究表明某些元素的缺失程度与"挥发性趋势"并不完全相符。另一方面,由于地球深部存在巨大的铁 核,它是由外部的液态铁和内部为固态铁组成,大部分研究普遍认为该固态铁具有六角密排堆积的晶体 结构,即hcp-Fe。而且地震波数据也表明铁核可能混入一些轻质元素,如S,Si等。因此,这里存在一 个科学问题:是否一些挥发性元素可在地球内部极端高压强条件下与铁反应,进而以少量掺杂的形式存 在于地球固态铁核内?为此,本工作利用第一性原理计算方法,系统的研究了一系列元素在内地核贮存 的可能性。计算结果表明,大量挥发性元素的确有可能在地球演化的过程中被封存在内地核中[*Nat. Common.* 15,3320 (2024)]。

基于以上分析,为研究挥发性元素是否可能存储于地核中,我们首先构建了大量挥发性元素掺入 hcp-Fe的结构模型,并进一步开展了系统的第一性原理计算研究。能量计算结果表明,一些挥发性元素 可能存在于hcp-Fe的结构内部,不仅如此,研究结果也说明高压是一个强有力工具,可以改变挥发元素 的亲铁性,即令一些非亲铁性的挥发元素趋于亲铁行为。这些研究结果表明,一些挥发性元素可能存在 于地核中,这为后续研究挥发性元素在地球内部丰度分配提供了理论参考。



图 1 硅酸盐地球中的元素丰度与不同压力下铁合金的稳定性

关键词:铁合金;高压地学;第一性原理计算 参考文献

- [1] Jones, J. H.; Drake, M. J. Nature, 1986, 322, 221.
- [2] Wood, B. J.; Halliday, A. N. Nature, 2005, 437, 1345.
- [3] Hirose, K.; Wood B.; Vočadlo, L. Nat. Rev. Earth Environ. 2021, 2, 645.
专题代号: H

地幔转换带三维电性结构揭示林伍德石含水异常

<u> 庄毓凯</u>

四川大学原子与分子物理研究所 Email: zhuangyukai@scu.edu.cn

摘要:深部三维电性结构反演成像的结果显示在地幔转化带 550-660 公里深部存在量级高导异常。这种 跨区域性的电性异常难以用板块俯冲、部分熔融等常规动力学模型解释。电导率对矿物微观成分(如铁、 水元素价态)和熔/流体相分布高度敏感。利用高温高压矿物电导率实验模拟可以直观的解析电磁反演 模型,从而合理的解释高导异常。本研究利用转换带下部的主导矿物林伍德石作为研究对象,利用金刚 石压腔四电极法结合双面激光加热技术系统测试了不同含水量(0-3 wt.%)林伍德石的高温高压电导率 剖面,为地球深部水循环提供了关键实验约束。

关键词: 地幔转换带, 林伍德石, 深部水循环, 电导率

克拉通边缘岩浆硫化物矿床深部控制机制的高温高压实验

研究

陈春飞

中国地质大学(武汉)

摘要:克拉通地壳富含金、铜和稀土等金属矿床,其下方的岩石圈地幔具有高厚度并富含挥 发分(如碳、硫和水)。尽管这些挥发分在成矿作用中起着关键作用,但关于它们在克拉通 地幔岩石圈中的分布特征、空间分布位置及其在金属元素初始富集过程中的具体作用仍不够 清晰。该研究汇总了全球克拉通橄榄岩中的硫和铜元素含量,发现克拉通边缘深度为160-190 公里处存在富含硫化物和铜的大陆根部。通过新的高压实验,研究表明,源自软流圈的含碳 酸盐硅酸盐熔体(carbonated silicate melts)在与岩石圈橄榄岩反应时,会损失硅酸盐成分并 演变为集中于克拉通边缘的碳酸岩熔体。在这一过程中,熔体中的二氧化硅含量显著降低, 导致硫在熔体中的溶解度大幅减少,硫化物因此从熔体中沉淀出来,在岩石圈地幔底部形成 富硫化物的大陆根部。同时,碳酸岩熔体沿克拉通边缘的迁移为这些区域的大陆根部补充了 大量硫。这一过程解释了为何岩浆成因的金属矿床和碳酸岩通常靠近克拉通边缘。这些研究 结果突出了碳酸岩熔体在成矿作用中的关键作用,并为金属矿床的勘探提供了重要的科学依 据与新思路。

地核极端温压条件下铁-氢合金的性质

<u>付苏宇</u>

浙江大学地球科学学院 Email: <u>suyufu@zju.edu.cn</u>

摘要:

地核由液态外核与固态内核组成。地球化学结果显示,地核主要由铁-镍(Fe-Ni)合金组成(McDonough and Sun, 1995)。然而,地震学观测发现,外核的密度比液态纯铁的低 7.5-7.6%,而内核的密度比固态纯铁的低~5%,被称为地核的密度亏损(Dziewonski and Anderson, 1981; Fei et al., 2016; Kuwayama et al., 2020)。为了解释这一密度亏损,前人提出地核中含有 5-10%的轻元素,如氢(H)、硅(Si)、氧(O)、硫(S)、碳(C)(Poirier, 1994; Hirose et al., 2021)。然而,地核中究竟含有哪些轻元素以及它们的含量有多少,目前仍没有定论。

氢在宇宙中的丰度极高且在高温高压下具有亲铁性,被认为是地核的重要组成部分。前人实验发现, 在氢饱和的环境中,铁和氢在高压下能形成富氢的合金,铁/氢比值高达5 (Pépin et al., 2014, 2017)。 矿物物理针对氢在硅酸盐熔体与液态铁合金间分配所展开的实验发现,氢在高温高压下由很强的亲铁 性:在早期岩浆洋分异过程中,0.3-0.6 wt%氢能进入地核,使得地核可能成为一个巨大的储水库(Tagawa et al., 2021)。然而,由于使用金刚石压腔技术开展铁-氢合金的高温高压实验极具挑战性,例如氢极易 扩散进入金刚石压砧使之破碎实验失败,因此,针对铁-氢合金在地核内部极端温压条件下物理化学性 质的实验研究仍很少。在本研究中,们结合金刚石压腔和激光加热技术,对铁-氢合金系统开展了地核 温压条件下的实验。我们采用同步辐射 X 射线衍射技术原位采集了高温高压下的 X 射线衍射图谱 (XRD),分析了铁-氢合金的相图及熔融性质。通过与地震学观测的波速密度对比,结果显示外核中最 多含有 0.83-0.9 wt%的氢。此外,我们的实验还发现,在氢饱和的环境中,铁和氢在 180-200 GPa 可能 会形成新的富氢的铁合金,为我们理解地球深部的氢含量以及极端温压条件下的物质结构提供新数据。 关键词:地核,铁-氢合金,金刚石压腔,高温高压,同步辐射 X 光衍射

- 1. McDonough, W.F., Sun, S.S. (1995). The composition of the Earth. Chemical Geology 120(3-4), 223-253.
- 2. Dziewonski, A. M., Anderson, D. L. (1981). Preliminary reference Earth model. Physics of the Earth and Planetary Interiors 25(4), 297-356.
- Fei, Y., Murphy, C., Shibazaki, Y., Shahar, A., Huang, H. (2016). Thermal equation of state of hcp-iron: Constraint on the density deficit of Earth's solid inner core. Geophysical Research Letters 43(13), 6837-6843.
- Kuwayama, Y., Morard, G., Nakajima, Y., Hirose, K., Baron, A. Q. R., Kawaguchi, S. I., et al. (2020). Equation of state of liquid iron under extreme conditions. Physical Review Letters 124(16), 165701.

地球大龟裂——高压驱动岩石圈裂解及其降压熔融的热力学

效应

唐春安

大连理工大学

tca@mail.neu.edu.cn

地球演化的历史,是一部地球热能在冷-热周期不断转换中渐进衰变的历史。岩石圈裂解-聚 合与地球冷-热波动的不断相互转化,诱发了一系列以升温与冷却、膨胀与收缩、熔融与凝 固为特征的地表变迁史。本报告基于热力学、物理学和力学的基本原理,从龟裂的形成机理 入手,提出了以地球自身热平衡为驱动力的地球演化新说——地球大龟裂。报告分为三个部 分:(1)简要介绍了用于岩石圈破裂模拟的地球模拟器 2.0 及其通过模拟发现的板块起源的 龟裂模式,特别介绍了高温高压驱动岩石圈破裂及其降压熔融的热力学效应:扩容膨胀与熔 融吸热;(2)基于热力学原理,通过建立地球系统的热平衡方程,阐述岩石圈破裂诱发本质 性冷-热波动的地球热演化机制;(3)基于重大地质事件与地球演化过程冷热波动相关性的 认识,介绍了重大地质事件可能存在同源驱动力的一些思考和研究展望。

含水斯石英高压相变机制

*<u>胡清扬</u>¹⁾, 李俊威^{1),2)}, 韩松松^{1),3)}
¹⁾ 北京高压科学研究中心, 北京, 100193
²⁾ 中国科学院广州地球化学研究所, 广州 510640
³⁾ 中国科学院精密从测量中心, 武汉, 430077
*qingyang.hu@hpstar.ac.cn

含水斯石英中的水可以通过四面体水离子缺陷(Si⁴⁺ = 4H⁺)[1]或是水分子羟基通道的形式存 在[2,3],本工作聚焦含水斯石英的高压相变,利用高压 X 射线衍射和第一性原理模拟研究含 水斯石英相变时的剪切不稳定性和弹性行为,从而分辨特定的 H 缺陷种类。我们发现无氢和 四面体离子缺陷的含水斯石英表现出相似的剪切不稳定临界压力。相比之下,具有氢填充通 道的含水斯石英结构具有天然扭曲,导致相变至 CaCl2型高压相的压力变低。我们的结果表明 H 缺陷类型的比例控制了剪切不稳定压力,也调控弹性波速下降的幅度。这一现象可应用于 解释地幔过渡带到中下地幔的低速区域与散射体,这些低速异常可能不仅反映了局部含水, 还显示不同氢缺陷类型的含水斯石英。

References

- [1] C. Nisr et al., Am. Miner. 102 (2018) 2180-2189.
- [2] Y. Lin et al. Earth Planet. Sci. Lett. 594 (2022) 117708.
- [3] J. Li et al., Sci. Adv. 9 (2023) eadh3784.

外地核条件下液态 Fe-Mg 合金热力学性质的第一性原理研究

付洁、徐杭礼

宁波大学物理科学与技术学院,高压物理科学研究院 Email: fujie@nbu.edu.cn

摘要:

液态外地核的主要成分是铁(Fe),除此之外还可能含有镍(Ni)和少量轻元素。以往研究表明常规轻元素(S、Si、O、C、H)的加入难以满足初步参考地球模型(PREM)[1]的密度和波速约束,而其他轻元素如镁(Mg)[2]、氮(N)[3,4]等也有可能匹配地震波的观测结果。由于 Mg 在外地核条件下是否存在的研究鲜见报道,因此,该工作通过第一性原理分子动力学模拟了液态 Fe-Mg 合金在外地核温度和压强条件下的状态参量(P, V, T),在此基础上建立液态 Fe-Mg 合金的物态方程,并对其热力学性质和输运性质进行了系统研究。结果表明,Mg 能够显著降低液态 Fe-Mg 合金的密度ρ、等温体弹模量 K_T和绝热体弹模量 K_s,同时,升高热膨胀系数α、Grüneisen 参数γ和声速 V_P,即 Mg 具备成为外地核候选轻元素的基本条件。最后,通过研究液态 Fe-Mg 合金的扩散系数 D 和粘度η,发现 Mg 原子与 Fe 原子在外地核条件下的 D 为同一量级,这有利于 Mg 原子在高温高压下与 Fe 原子充分混合。并且,Mg 原子在液态 Fe 中的固溶方式为替换取代。

通过与 PREM 数据比较,如果假设 Mg 是外地核中唯一的轻元素,我们发现 Mg 的最大含量约为 5.24~7.46 wt.%。此外,核幔边界处的 Mg 浓度高于内外核边界,差值约为 0.2~0.6 wt.% Mg,这可能与 下地幔底部含镁矿物等处于熔融状态有关。然而,Fe-Mg 合金的*p*和 *V*_P无法沿着整个地热线与 PREM 完 全匹配。综上所述,Mg 可能是外地核的轻元素之一,但不可能是外地核中的唯一轻元素。鉴于轻元素 之间的协同作用,我们认为可能的外地核中候选三元组分模型有 Fe-Mg-S、Fe-Mg-C 等。

关键词:外地核组分、物态方程、热力学性质、Fe-Mg 合金、第一性原理分子动力学

参考文献

- Bajgain, S. K., Mookherjee, M., Dasgupta, R., Ghosh, D. B., & Karki, B. B. (2019). Nitrogen Content in the Earth's Outer Core. *Geophysical Research Letters*, 46(1), 89–98.
- 2. Dziewonski, A. M., & Anderson, D. L. (1981). Preliminary reference Earth model. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 25(4), 297–356.
- 3. Kádas, K., Vitos, L., Johansson, B., & Ahuja, R. (2009). Stability of body-centered cubic iron-magnesium alloys in the Earth's inner core. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *106*(37), 15560–15562.
- Kusakabe, M., Hirose, K., Sinmyo, R., Kuwayama, Y., Ohishi, Y., & Helffrich, G. (2019b). Melting Curve and Equation of State of β-Fe7N3: Nitrogen in the Core? *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, *124*(4), 3448–3457.

专题代号: H

核−幔边界超离子态含水相稳定性的计算研究

<u>何宇^{1,2}</u>、张为³、胡清扬²、孙士川⁴、胡家琦¹、刘道弘¹、周丽³、代立东¹、

Duck Young Kim²、Simon A. T. Redfern⁴、刘耘^{1,5}、李和平¹、毛河光²

1中国科学院地球化学研究所,贵阳 550081

2北京高压科学研究中心,上海 201203

3 贵州师范大学, 地理与环境科学学院, 贵阳 550025

4 Asian School of the Environment, Nanyang Technological University, 50 Nanyang Avenue, Singapore 639798

5 成都理工大学,地球科学学院,行星科学国际研究中心,成都 610059

Email: heyu@mail.gyig.ac.cn

摘要:

含水矿物的性质与稳定性是揭示地球内部水循环奥秘的关键。在下地幔极端条件下,含水矿物会转 变为超离子态,但这一转变如何影响其稳定性及脱水过程尚不明确。通过第一性原理和深度学习势能分 子动力学模拟,我们发现在δ-AlOOH 中存在氢离子与铝离子同时在氧亚晶格中快速扩散的双超离子态 转变。这些高迁移率元素为体系引入了额外熵增,使其在 140 GPa 和 3800 K 的极端条件下仍能保持结 构稳定。结合超离子态 H₂O 的相图和自由能计算,发现在核-幔边界(CMB)条件下脱水反应在热力学 和动力学上均难以发生。因此,水或能够在地球演化历史中长期富集于深部下地幔,形成古老的地幔底 部水储库。

关键词:核-幔边界、含水相、超离子态、自由能、脱水反应

温度引起的碳酸钙非晶化及其超低波速的地学效应

侯明强

中国科学院精密测量科学与技术创新研究院精密大地测量与定位全国重点实验室

摘要:

碳酸钙是地球深部碳循环的重要载体,但是其在 3 GPa、1000 K 以上的高温高压相一直存在争议。利用高温高压实验技术结合同步辐射,我们研究了碳酸钙的高压相结构和声速。XRD 结果表明,在压力大于 3 GPa 时,随着温度增加,当温度大于 1000 K 时碳酸钙将逐渐由文石相变成非晶相且非晶相可以维持至熔化。超声声速测量结果表明,非晶碳酸钙在 3.5 GPa 左右时 VP 和 VS 忽然降低 35% 和 52%。声速降低的温压范围与克拉通中部岩石圈地震波速不连续区域(MLDs)相同,研究表明 1-2 vol.%的碳酸钙可以导致地震波速降低 2-10%,碳酸钙可能是导致 MLDs 的重要候选机制。

Differentiation of Enstatite chondrite-like planetesimals

and planetary embryos

李琼^{1,2} 杜蔚^{1,3} 杨晶⁴ 刘兆东⁵ 陈斐洋⁶ 王永刚⁶ 宗克清⁷

中国科学院 地球化学研究所,关键矿产成矿与预测全国重点实验室,贵阳 550081;
2. 中国科学院大学 地球与行星科学学院,北京 101408;
3. 中国科学院 比较行星学卓越创新中心,合肥 230026;
4. 中国科学院 地球化学研究所,月球与行星科学中心,贵阳 550081;
5. 吉林大学 综合极端条件高压科学中心,长春 130012;
6. 宁波大学 机械工程与力学学院,宁波 315211;

7. 中国地质大学(武汉)地球科学学院,武汉 430074;

Enstatite chondrites (E-chondrite) exhibit isotopic signatures remarkably consistent with those of Earth, suggesting their potential as analogous materials to the building blocks of our planet. The impactors similar as E-chondrites that contributed to the accretion of the proto-Earth are believed to have undergone differentiation. However, the differentiation of planetesimals requires a mechanism for metal segregation, which is challenging given the small size of planetesimals and the absence of gravity triggered permeable flow. Partial melting of silicates may be necessary for this process. The high melting temperature of MgSiO₃ raises doubts about whether the heat sources from short-lived decay isotope systems (e.g., ²⁶Al, ⁶⁰Fe) are sufficient to melt the E-chondrite-like planetesimals.

This study present high-pressure and high-temperature melting experimental results on Enstatite chondrite Sahara 97096 (EH3) and 3D computerized tomography analysis of metal segregation under various conditions. Thermodynamic calculations indicate that heating by the decay of the ²⁶Al-²⁶Mg and ⁶⁰Fe-⁶⁰Ni system can sufficiently increase temperatures to melt over 25% of the silicate in Sahara 97096, thereby initiating metal-silicate segregation. Impactors contributing to the accretion of the proto-Earth should have been larger, potentially undergoing "core-mantle" differentiation. Large planetary embryos, comparable in size to the Moon, are expected to have formed a core and a magma ocean very early in their history and would have cooled down subsequently.

Key words: Enstatite Chondrite; Earth's building blocks; High-pressure and high-temperature experiment

高压变形及微观结构与矿物含水状态

刘锦、田永君

燕山大学高压研究中心 Email: jinliu@ysu.edu.cn、fhcl@ysu.edu.cn

摘要:

深部矿物水赋存状态研究是地球科学领域的重大前沿课题。作为地表水通过俯冲带进入地球内部的 主要载体,含水矿物的相变行为主导着深部水循环过程。最新高压实验研究表明,俯冲带中的含水矿物 相可将水体输运至核幔边界。矿物脱水过程对地幔物理化学性质具有多重调控作用:不仅显著改变地幔 流变特性——特别是控制地幔对流的关键参数地幔黏度;同时通过影响矿物相平衡制约深部物质组成。 更为重要的是,该过程与岩浆生成(火山活动的物质基础)及深源地震活动密切关联,对地表地质过程 和人类生存环境具有深远影响。值得注意的是,主要地幔矿物的水溶解度存在显著约束,这使得高压含 水矿物在地幔极端温压条件下的稳定性成为决定深部储水能力和物质通量的关键因素,可能从根本上改 变现有深部水循环理论框架。

在众多含水矿物中,铝硅酸盐作为俯冲沉积物的主要组分,对深部水输运具有特殊意义。然而其如何在地幔过渡带(压力15-23 GPa,温度1600-2000K)极端环境下维持结构稳定性,仍是亟待解决的关键科学问题。本研究通过高温高压实验(15.5-22.0 GPa 压力及1400-1800 ℃温度条件下合成的单晶样品),系统揭示了典型含水铝硅酸盐的微观结构演化规律。X 射线衍射与光谱分析表明,样品呈现显著的结构无序化特征:在高温作用下,Al³⁺和 Si⁴⁺发生异常占位,进入常规有序结构中本应空置的四面体与八面体位点。这种原子尺度的结构重组引发晶格畸变,显著提升了氢氧根的固溶能力。该发现不仅修正了传统矿物学理论中关于含水相热稳定性的认知,更重要的是揭示了结构无序化对深部水循环的关键调控作用,为深入理解地球深部物质循环及其与地表宜居环境的关联机制提供了新的理论基础。关键词:高温高压,含水铝硅酸盐,微观结构,深部水循环。参考文献

- Baoyun Wang, Jin Liu*, Yanyao Zhang, Baisheng Nie, Wei Yang, Jialong Hao, Xing Ding, Youjun Tian, 2025. High-temperature structural disorders stabilize hydrous aluminosilicates in the mantle transition zone. Nature Communications 16, 1038.
- 2. Weibin Gui, Jin Liu*, Ao Deng, Jun Hu, Penghui Sun, Changzeng Fan, Fahui Xiong*, 2025. Sublattice disorder and Fe-Mg substitution in brucite: Implication for the subduction-zone water cycle. American Mineralogist, 110.
- Baoyun Wang*, Jin Liu*, Suyu Fu, Pu Xiao, Li Li, Xing Ding, Wansheng Xiao, 2023. New hydrous phases in the Al₂O₃-SiO₂-H₂O system under the mantle transition zone conditions. Science China Earth Sciences 66, 730-737.

实验研究熔体水含量对角闪石与安山质熔体间第一过渡系元素及镓、 锗分配系数的影响

刘凌寒1、张宏罗1、黄方2、王锦团3、郭璇2、王萌1、张招崇1

1、中国地质大学(北京)地球科学与资源学院

2、中国科学技术大学地球和空间科学学院

3、中国科学院广州地球化学研究所

Email: linghanliu@email.cugb.edu.cn

摘要:

钴、镍、钒等第一过渡系元素(FRTEs)及镓、锗在新能源、新材料及航空航天领域具有重要应用, 是战略性关键矿产。作为关键金属富集的主要载体,铁氧化物铜金矿床(IOCG型)与铁氧化物磷灰 石矿床(IOA型)的时空分布与板片俯冲过程高度耦合,指示这两类矿床的形成与板块俯冲密切相关。 然而,成矿金属在富水弧岩浆演化过程中如何富集仍缺乏定量约束。

准确测定元素在矿物和含水熔体之间的分配系数是阐明成矿金属富集机制的关键。角闪石是弧岩浆分 异过程中重要的矿物相。前人通过实验或自然样品研究了温度、压力以及熔体成分对 FRTEs 在角闪石 和熔体间分配系数(DFRTEs amp/melt)的影响。角闪石中含有结构水(OH-),熔体中的 H+易与其形 成电价配合,从而影响 DFRTEs,Ga,Ge amp/melt,但目前熔体水含量对 DFRTEs,Ga,Ge amp/melt 的影响 仍不清楚。

本研究在 850-1100 °C和 1.25 GPa 条件下开展实验,测定了角闪石与含水熔体(4-8wt%)间 FRTEs 和 Ga、Ge 的分配系数。实验结果表明,除 Cu 外,FRTEs 在角闪石中相容。DMn,Zn,Ga,Ge amp/melt 轻 度相容,对应 Mn 的分配系数为 2.8-6.4, Zn 为 2.0-4.5, Ga 为 1.5-1.9, Ge 为 1.7-2.0。DTi,V,Cr,Fe amp/melt 中度相容,对应 Ti 的分配系数为 5.6-14, V 为 3.9-30.1, Cr 为 5.4-71.1, Fe 为 5.6-12.7。 DCo,Ni amp/melt 高度相容,对应 Co 的分配系数为 12.9-41.7, Ni 为 69.8-210.2。我们使用皮尔逊相关 系数评估温度、水含量及熔体成分对 DFRTEs,Ga,Ge amp/melt 的影响,获得了相应的热力学方程。在 此基础上,我们结合前人报道的平衡矿物与熔体之间的 FRTEs 分配系数,定量模拟了弧岩浆演化过程 中成矿金属元素的分配行为。模型结果显示,单独的分离结晶过程无法形成第一过渡系元素成矿母岩 浆。

关键词: 第一过渡系元素、角闪石/熔体、分配系数、水含量、弧岩浆

428

高温高压下橄榄石含水性能的演变特征及其微观机制

刘怡梦、刘锦、孙鹏辉、胡骏、杨国春、田永君

燕山大学高压科学中心 Email: JinLiu@yus.edu.cn; 1779909751@qq.com

摘要:

在地球深部,水主要以质子 H⁺和羟基 OH 的形式赋存于地幔矿物的晶格中。上地幔主要矿物橄榄 石等名义上无水矿物(NAMs)中的结构水含量极低,对解释地震波异常、地幔电导率变化等地球物理 观测具有重要意义。前人研究表明,在1-3GPa 条件下,橄榄石水含量随温度、铁含量系统性上升;然 而,橄榄石在 6-9GPa 高压条件下含水量随呈非线性变化,存在温度拐点,这表明水在橄榄石内部结构 中的赋存形式可能发生变化:在临界温度约 1100-1200℃以上,羟基缺陷的形成焓可能由负转正,导致 热激活过程反而抑制水溶解。本工作旨在讨论橄榄石含水性能随温度、压力、铁含量、氧逸度等因素变 化的实验规律及其对水赋存机制的影响和微观结构特征,为认识地球水循环系统提供新思路。

关键词: 橄榄石、含水量、高温高压 参考文献:

1. Bell, David R., et al. "Hydroxide in olivine: A quantitative determination of the absolute amount and calibration of the IR spectrum." Journal of Geophysical Research: Solid Earth 108.B2 (2003).

层状二维三氧化钼的压力诱导相变与宽谱光响应

柳凯祥1,代立东2

1. 贵州民族大学材料科学与工程学院

2. 中国科学院地球化学研究所地球内部物质高温高压院重点实验室

摘要:

金刚石压腔技术是高温高压条件下研究地球内部矿物及材料物理性质的有效手段。最近, 贵州民族大学材料科学与工程学院柳凯祥研究团队将金刚石对顶砧高压设备与光电测试平 台、拉曼光谱、透射电子显微镜(TEM)、扫描电子显微镜(SEM)以及第一性原理计算有 机结合,对金属氧化物矿物进行了深入研究 [1,2]。

本次工作利用金刚石压腔系统结合原位拉曼光谱、X 射线光电子能谱、光电流测试、电导率测量和理论计算的联合分析,系统探究了三氧化钼(α-MoO₃)在高压下的结构演变与 光电行为。实验观察到两个明确的相变过程:首先在约10.1 GPa转变为 MoO₃-II 相,随后 在约25.3 GPa转化为高压 MoO₃-III 相。这种结构演化伴随着显著的光电性能提升一在37.8 GPa压力、365 nm光照条件下,光电流密度从1.2 GPa时的0.0628 mA cm⁻²增至29.10 mA cm⁻² (增幅达434倍),响应率从1.366 mA W⁻¹提升至632.7 mA W⁻¹。这种增强效应源于压力诱 导的电导率提高、带隙窄化及光吸收能力改善。值得注意的是,高压 MoO₃-II 和 MoO₃-III 相表现出延伸至近红外波段(980 nm)的光探测能力。理论分析表明,这些反常现象可归因 于氧空位形成所引入的中间带隙态,这些中间能级有效促进了可见光与红外光谱区的载流子 激发。本研究成果证实高压工程是优化三氧化钼光电性能的有效策略,为其在光电探测器系 统中的实际应用提供了新思路。

参考文献

[1] Liu K, Dai L, Liang W, et al. Pressure Effects on the Optoelectronic Property of Nanocrystalline Anatase with Different Sizes[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2024, 128(47): 20297-20309.

[2] Liu K, Yang Y, Wu L, et al. Pressure-Induced Enhancement of Photoelectric Properties of ZnO Nanoparticles in the Ultraviolet Band: Implications for Electronic Device Applications[J]. ACS Applied Nano Materials, 2024, 7(5): 5348-5357.

基于机器学习的二氧化硅相变和弹性研究: 对地球地幔不连续面的

启示

王川1、陈博1,2,3、余晓翔1,2,3、康冬冬1,2,3、曾启呈2,3,4*、戴佳钰1,2,3*

1、国防科技大学理学院,长沙,410073;

2、国防科技大学,极端条件物理及应用湖南省重点实验室,长沙,410073;

3、 国防科技大学, 湖南省物态模拟与调控基础学科研究中心, 长沙, 410073;

4、 国防科技大学前沿交叉学科学院, 长沙, 410073

Email: zengqiyu@nudt.edu.cn 和 jydai@nudt.edu.cn

摘要:

SiO₂是俯冲洋壳的重要组成部分,其高压相的性质对于理解地球内部结构和性质至关重要。一系列 高压实验和理论研究表明在地幔条件下,SiO₂会经历柯石英→斯石英→β-斯石英→赛石英的相变序列, 然而现有的实验和理论相边界结果之间的争议尚未解决。本研究利用基于机器学习的非平衡热力学积分 方法,报告了 SiO₂在地幔条件下完整的热力学相图,解决了从柯石英到赛石英三个固固相边界结果之 间的争议。结合基于大规模分子动力学模拟的弹性计算结果,本研究的结果表明 SiO₂从柯石英到赛石 英固固相变分别是上地幔约 260-320 公里深处 X 不连续面、下地幔 1670-1740 公里深处不连续面和 D" 层不连续面的重要成因。此外,精确的相边界结果也为地幔温度,尤其是核幔边界温度提供了良好的约 束,展示了机器学习技术解决地球内部复杂地质问题的力量。

Superionic behavior of oxygen defected davemaoite and its impact on early Earth oxidation

Zifan Wang、Yu He、Ho-kwang Mao、Duck Young Kim

Center for High Pressure Science & Technology Advanced Research (HPSTAR) Email: duckyoung.kim@hpstar.ac.cn

Abstract:

Davemaoite (CaSiO₃ perovskite), an elemental mineral in Earth's lower mantle, is known to be crystallized from early magma ocean¹. However, the influence of oxygen defects on its physical properties under early Earth conditions has not been systematically explored. In this presentation, I will show how oxygen vacancies influence the stabilities and diffusive behaviors of davemaoite structures by conducting machine learning molecular dynamics simulations. Our results revealed the superionic transitions driven by oxygen's diffusion, significantly increasing electrical conductivity. Furthermore, enhanced oxygen vacancies concentrations lead to the wider superionic phase regons. These findings suggest that oxygen-defected davemaoite could be served as a potential major reservoir and carrier of oxygen in deep Earth, profoundly influencing deep-Earth oxidation cycles and the redox mechanisms in early Earth mantle.

Keywords: Davemaoite; Oxygen defect; Machine learning; Early Earth; Oxygen cycle References

1. K. Yin, A. B. Belonoshko, Y. Li, X. Lu, Davemaoite as the mantle mineral with the highest melting temperature. *Sci. Adv.* **9**, eadj2660 (2023).

地球外核中液态铁轻元素合金的第一性原理分子动力学研究

谢妙相1、何宇1、付洁2

1 中国科学院地球化学研究所地球内部物质高温高压院重点实验室 2 宁波大学高压物理科学研究院 Email: xiemiaoxu@mail.gyig.ac.cn

摘要:

地球外核主要由液态铁(Fe)及若干轻元素组成,其中 S、O、Si、C、H 被认为是关键轻元素,近 期研究亦提出 N 可能存在于外核中 (Bajgain et al., 2019)。轻元素的种类和含量对于揭示地球深部物质 组成、核幔边界与内核边界处的物质交换过程具有重要意义。值得注意的是,Fe-O、Fe-C、Fe-H 合金 在内核条件下可能表现出超离子态行为 (He et al., 2022),为解释内核特性提供了新视角。基于此,我们 对外核温压下的 Fe-O、Fe-C 和 Fe-H 合金开展了系统性研究。

本研究采用第一性原理分子动力学(FP-MD)模拟,系统预测了外核条件下(~136-330 GPa, 4000-6000 K)下液态 Fe-O、Fe-C和 Fe-H 合金的密度、声速及其热力学性质。研究结果表明,含 6.1 wt% O 的 Fe-O 合金可同时满足地震学所约束的密度与声速(图 1); Fe-C 合金中,5.1-6.6 wt% C 能解释外核的密度亏损,而 2.9-3.7 wt% C 更契合声速观测。考虑这一差异,我们进一步拓展至 Fe-C-O 三元体系,以更全面探讨外核的可能成分。最终,我们在三条不同地热线条件下分别提出了最佳模型组合。总体而言,本研究通过严谨的 FP-MD 模拟,为外核组成提供了新的理论模型。这不仅深化了对地球外核组成认识,也为核幔边界及内核边界的物质交换和化学过程研究提供了重要参考。





关键词:状态方程;第一性原理分子动力学;热力学性质;液态铁-轻元素合金;地球外核参考文献

- Bajgain, S. K., Mookherjee, M., Dasgupta, R., Ghosh, D. B., & Karki, B. B. (2019). Nitrogen Content in the Earth's Outer Core. *Geophysical Research Letters*, 46(1), 89–98. https://doi.org/10.1029/2018GL080555
- He, Y., Sun, S., Mao, H.-K., Kim, D., Li, H., & Jang, B. G. (2022). Superionic iron alloys and their seismic velocities in Earth's inner core. *Nature*. https://doi.org/10.1038/s41586-021-04361-x

极端冲击条件下 MgSiO₃ 的汽化研究

徐飞洋、李治国

中国工程物理研究院流体物理研究所 Email: zhiguo_li@foxmail.com

在行星形成的早期阶段,天体之间频繁发生剧烈碰撞,碰撞速度可高达每秒数十公里。这类高能撞击不仅可能引发行星组分的熔融,甚至还可能导致其汽化。因此,深入研究行星物质在极端冲击条件下的响应行为对于揭示行星的形成与演化机制具有重要意义。MgSiO3 是类地行星下地幔中最主要的矿物之一,其在高压下的物理性质对于理解行星内部的动力学演化过程至关重要。本研究采用第一性原理分子动力学方法,系统地计算了 MgSiO3 的临界点以及其雨贡纽状态方程,并进一步借助热力学积分方法,求得沿雨贡纽路径的熵变化。当压缩过程中熵的增加超过常压沸点对应的熵值时,材料将发生汽化。我们的结果表明,MgSiO3开始发生汽化的临界压力约为 290 GPa,而在行星形成末期普遍存在的高速撞击过程足以产生该临界压力。这一发现意味着,在大碰撞中参与碰撞的天体物质将以不同程度被抛射或剥离,进而导致其组成发生变化,从而对行星的最终结构和化学组成产生深远影响。

关键词:极端冲击,临界点,气液相边界,汽化,MgSiO3

深部岩浆洋环境中三价铁的稳定化

张宏罗¹, Marc M. Hirschmann², Oliver T. Lord³, Anja Rosenthal^{4,5}, Sergey

Yaroslavtsev⁴, Elizabeth Cottrell⁶, Alexandr I. Chumakov⁴, Michael J. Walter⁷

1中国地质大学(北京)地球科学与资源学院学院

 ²Department of Earth Sciences, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455, USA.
³School of Earth Sciences, University of Bristol, Bristol BS81RJ, UK.
⁴ESRF–The European Synchrotron, CS40220, 38043 Grenoble Cedex 9, France.
⁵Research School of Earth Sciences, Australian National University, Canberra, Australia.
⁶National Museum of Natural History, Smithsonian Institution, Washington, dc 20560, USA.
⁷Earth and Planets Laboratory, Carnegie Institution for Science, Washington, dc 20015, USA. Email: zhanghl@cugb.edu.cn

摘要:

在与地核达到平衡的深部岩浆洋中产生的三价铁(Fe₂O₃)决定了类地行星早期的氧化还原状态和 大气组成。先前的实验(压力≤28GPa)^{1,2}和第一性原理计算³表明,深部陆地岩浆洋会产生相当数量 的三价铁离子(Fe³⁺),但预测的Fe³⁺/ΣFe比例相差一个数量级。我们通过同步辐射穆斯堡尔光谱分析 了与铂铁合金在 38 至 71GPa、3600 至 4400 K 条件下平衡熔体淬火得到的玻璃,得到了其 Fe³⁺/ΣFe 比 值。结果显示,在平均合金-硅酸盐平衡压力为 28 至 53GPa 的地球岩浆洋中,Fe³⁺/ΣFe 比值为 0.056 至 0.112,产生的 Fe₂O₃ 足以解释现代地球全硅酸盐的氧化还原状态。同时,早期岩浆洋时期地表条件 接近或比铁-钨铁矿(IW)更氧化,从而使早期原始大气富含 CO 和 H₂O。 关键词:岩浆洋,早期大气,氧化还原状态,同步辐射穆斯堡尔谱,激光加热金刚石压腔 参考文献

- 1. K. Armstrong, D. J. Frost, C. A. McCammon, D. C. Rubie, T. Boffa Ballaran, Deep magma ocean formation set the oxidation state of Earth's mantle. *Science* **365**, 903–906 (2019).
- H. Kuwahara, R. Nakada, S. Kadoya, T. Yoshino, T. Irifune, Hadean mantle oxidation inferred from melting of peridotite under lower-- mantle conditions. *Nat. Geosci.* 16, 461–465 (2023).
- 3. J. Deng, Z. X. Du, B. B. Karki, D. B. Ghosh, K. K. M. Lee, A magma ocean origin to divergent redox evolutions of rocky planetary bodies and early atmospheres. *Nat. Commun.* **11**,2007 (2020).

闪石族矿物高压相变与亚稳态的原位拉曼光谱研究

郑直、梅升华

中国科学院深海科学与工程研究所 Email: zhengzhi@idsse.ac.cn

摘要:

闪石族矿物作为富含结构水的含水矿物,是深部地球水循环的重要介质。本报告基于原位高压拉曼 光谱,系统研究了两种典型闪石族矿物——铁闪石(grunerite)和锂蓝闪石(holmquisite)——的高压 相变行为及其亚稳态特征。研究表明:铁闪石在高压下发生由 C2/m 相向 P21/m 相的结构相变,在约 1.46 GPa 时其 OH 振动模式产生明显分裂,提示氢位点由等效向非等效分化;在 17.81 GPa 以上又观察到新 的 OH 模式分裂,暗示可能发生进一步结构转变。其低波数 M-O 振动模式的演化亦反映链状硅氧四面 体结构的重构与键长突变。相比之下,锂闪石的 Pnma 结构在高压下保持稳定直至 17.6 GPa,无明显相 变信号;但其 OH 振动谱分裂特征逐渐增强,表明氢位点环境差异随压力增大而加剧,可解释为压力驱 动的微观结构调整。以上研究成果凸显了原位拉曼光谱在识别氢位点异质性、解析晶体结构相变与亚稳 机制中的应用价值。这些结果揭示了闪石族矿物在深部地球条件下多样的高压响应行为,为理解含水闪 石族矿物的结构稳定性、亚稳态保留及其在深部水循环中的携水潜能提供了重要的谱学依据。



图 1 高压下铁闪石的 OH 振动模式

关键词:闪石族矿物;高压相变;原位拉曼光谱;亚稳态;地球深部水循环参考文献;

1. Zhi Zheng; Shaohao Zou; Chuanjun Wu; Shenghua Mei, American Mineralogist (2025), 10.2138/am-2024-9560

下地幔顶部温压条件下 CaAl₂O₄-MgAl₂O₄体系相关系的高温高压实 验研究

<u>何金泽 1,2</u>、刘兆东 2、朱金涛 1,3、Takayuki Ishii 1*

1日本冈山大学行星物质研究所

²吉林大学高压与超硬材料全国重点实验室,综合极端条件高压科学中心 3 北京大学地球与空间科学学院 Email: pmuh6axz@s.okayama-u.ac.jp

摘要:

大量实验研究表明,在下地幔条件下,新六方铝相(NAL 相,化学式为 AB₂C₆O₁₂)和铁酸钙相(CF 相,AB₂O4或 XYZO4)是俯冲洋壳中的主要相^[1-2]。尽管 CF 相被认为能稳定存在至下地幔底部,但 NAL 相的稳定性仍存在争议。此外,这些矿物相在下地幔条件下的成分变化尚不明确。在俯冲洋壳富铝相的 重要端元 CaAl₂O4-MgAl₂O4体系中,当温度高于 1200°C、压力超过 15GPa 时,富 CaAl₂O4 或 MgAl₂O4 端元 CF 相与 CaAl₂O4-MgAl₂O4 体系中,当温度高于 1200°C、压力超过 15GPa 时,富 CaAl₂O4 或 MgAl₂O4 端元 CF 相与 CaAl₂O4-MgAl₂O4 的 NAL 相可稳定共存^[3-4]。随着压力升高,富 CaAl₂O4 的 CF 相和 NAL 相中 MgAl₂O4 组分的含量会增加。然而,由于地幔中温度存在变化,这些物相的化学成分和稳定性的 温度依赖性尚未得到研究。本研究使用多面砧大腔体压机,在 15 至 25 GPa 和 1100 至 2000 °C 条件下 对 CaAl₂O4-MgAl₂O4 体系进行了高压相平衡实验,以揭示这些物相在地幔中的成分变化规律与稳定条 件。

实验结果表明,在当前研究的压力和温度范围内,CF 相和 NAL 相均保持稳定。与前期研究一致,在 1100 至 2000 ℃ 温度区间内,随着压力升高,富 CaAl₂O₄ 的 CF 相中 MgAl₂O₄组分的固溶度增加。 研究还发现,温度升高同样会促进富 CaAl₂O₄ 的 CF 相中 MgAl₂O₄组分的固溶。在二元相图中,NAL 相稳定场的 MgAl₂O₄组分范围随温度升高从 3 mol%轻微扩展至 5 mol%。由于富 CaAl₂O₄ 的 CF 相化学 成分随压力和温度呈现系统性变化,我们认为该成分变化规律可用于高压高温条件下的大腔体压机压力 标定。

关键词: 铁酸钙相、新六方铝相、CaAl₂O₄-MgAl₂O₄体系、大腔体压机、俯冲洋壳

参考文献

- 1. Ishii T, Miyajima N, Criniti G, Hu Q, Glazyrin K, Katsura T. Earth Planet Sci Lett. 2022;584:117472.
- 2. Irifune T, Ringwood AE. Earth Planet Sci Lett. 1993;117(1-2):101-10.
- 3. Akaogi M, Hamada Y, Suzuki T, Kobayashi M, Okada M. Phys Earth Planet Inter. 1999;115(1):67–77.
- 4. Kimura F, Kojitani H, Akaogi M. Phys Earth Planet Inter. 2020;106632.

冲击加载下物质结构相变的实验和理论协同研究

陈博,曾启昱,王川,常晓驹,戴佳钰

国防科技大学理学院 湖南省极端条件物理与应用重点实验室 湖南省"物态模拟与调控"基础学科研究中心 Email: jydai@nudt.edu.cn

摘要:极端动态载荷下的响应机制,是航天工程、惯性约束聚变等国防科技领域的核心科学问题,其与 行星内核形成、小行星碰撞等天体行为具有参数同源性,也是天体物理基础科学研究的关键切入点。相 较于静态加载,物质在动态载荷下涉及化学键解构、相变、成核等多时空尺度特征,如何构建热力学状 态与微观结构时空耦合的动力学模型,是实验及理论研究共同面临的挑战。当前研究存在显著瓶颈,一 方面动态压缩实验结果与静态压缩理论预测呈现系统性偏差,动载条件下微观结构的瞬态演化机制尚未 明晰;另一方面,受限于现有理论模拟的时空尺度与实验诊断的分辨能力,两者数据难以实现跨尺度定 量对标。我们融合人工智能与物理计算方法,将第一性原理精度计算扩展至百万原子量级,探究极端条 件下物质结构相变的动态过程,并在神光-III等动高压实验平台上获得了验证。揭示了冲击压缩下由无 序结构诱导的金 FCC-BCC 相变过程、热力学与动力学竞争机制产生的铜 HCP/BCC 共存亚稳态、低熵 液体驱动的金刚石-BC8 相变、准等熵加载下由界面动力学主导的水-冰 VII 超快相变等新奇现象,提出 了适用于超高应变率下水亚稳极限的统一标度模型。依托大尺度、高精度理论计算与超高压、高分辨实 验测量相结合的协同研究,相互支持验证,厘清动载压缩的结构变化规律,将促进非平衡相变物理模型 的构建,进而推动新型惯性约束聚变靶丸优化、极端条件服役装备研发,以及行星演化、天体碰撞等基 础物理研究中关键科学认知的进步。



图 1 准等熵加载下界面主导的水-冰 VII 超快相变 关键词:冲击压缩,动载相变, XRD 诊断,深度学习分子动力学

基于先进光源的典型金属材料冲击相变研究

方旭1, 唐敏学2, 邓钰杰1, 蔡洋1

1 中物院成都科学技术发展中心,顶峰多尺度科学研究所,四川,成都 2 欧洲 X 射线自由电子激光,德国,汉堡

Email: caiy@pims.ac.cn

摘要:

近年先进光源产生的X射线具有高单色性、高亮度、高时间分辨、高相干性和低发散度的特点, 结合国内外光源专用线站配置的气炮、激光等动态高压加载装置,可实现材料在动态极端环境的原位实 时探测。本文利用欧洲自由电子激光 HED 线站,研究了金属单质钴和 FeMnNiCoCr 高熵合金在激光冲 击加载下的相变问题。通过对原位衍射信号进行分析,首次通过实验方法发现了冲击加载下金属钴的 HCP-FCC 相变和等原子比 FeMnNiCoCr 高熵合金的 FCC-HCP-BCC 相变。结合 VISAR 信号分析,获得 钴的冲击相变压力约为 143 GPa,高熵合金中的 FCC-HCP 和 HCP-BCC 相变的压力分别为低于 20 GPa 和 170 GPa 左右。另外,通过对衍射信号进行的织构分析,还获得了上述相变的相变路径。除此之外, 本文还对北京第四代同步辐射光源结构动力学线站的硬件能力进行了介绍,对后续的实验前景进行了展 望。

关键词:X射线自由电子激光;同步辐射光源;冲击相变;原位超快X射线衍射;单质钴;FeMnNiCoCr高熵合金。

冲击熔融铁的热状态方程研究

甘波¹、李俊²、张友君¹

1 四川大学原子与分子物理研究所,四川 成都 610065 2 中国工程物理研究院流体物理研究所,四川 绵阳 621999 E-mail: ganbo@scu.edu.cn

摘要:铁是地核的主要成分,液态铁在高压高温(P-T)条件下的物理性质对于揭示地核的成分、 结构及动力学过程至关重要。然而,在实验室中模拟外核的极端环境并精确测量熔融介质的物理性质仍 面临挑战。目前,激光加热金刚石压腔静高压实验己能够在约 120 GPa 和 4500 K 条件下测量液态铁的 密度,但与外核的温压条件仍存在差距。尽管冲击波动高压实验已成功测量数百 GPa 压力下熔融铁的 密度(ρ)和纵波声速(V_P),但其冲击温度的精确约束仍然不足。基于此,我们基于二级轻气炮动高压 实验平台,利用瞬态辐射高温计精确测定了熔融铁在~365 GPa 下的冲击温度,实验结果比早期使用薄 膜样品和低精度高温计的测量结果低 500-2000 K。结合己有的冲击波实验数据,我们建立了液态铁沿 Hugoniot 的 *P-T-p-V*P关系,并通过热力学修正获得了液态铁沿地核绝热线的密度和声速。研究结果表 明,外核相对于液态铁表现出显著的密度亏损和声速过剩,且密度亏损随深度增加,而声速过剩随深度 减小。在内-外核边界处,基于 PREM 模型的外核密度亏损和声速过剩分别达到 8.74%和 2.00%。这些 差异无法通过单一轻元素的加入同时解释,表明外核可能含有多种轻元素,这些元素对液态铁的声速具 有不同的影响。这一发现为外核的化学组成及其地球动力学过程提供了新的关键约束。

关键词:冲击波;铁;冲击温度;状态方程;波速

冲击下 Si0₂的物理力学行为研究

宋文豪1、甘波1、张友君1,2,*

1四川大学原子分子物理研究所 2四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室 Email: zhangyoujun@scu.edu.cn

摘要:

SiO₂在大陆地壳中无处不在,因此几乎受到所有大陆撞击的影响。由于其在地球物理学和行星科学中的深远应用,石英一直是动态压缩下研究最广泛的材料之一^[1-3]。尽管进行了广泛的研究,但其在不同加载方式下的实验研究,以及理论研究之间均存在差异^[4-11],特别是在压缩过程中的应变率影响方面。 我们通过使用一级、二级轻气炮在高应变率下测量了 z-cut 单晶石英和熔融石英的 Hugoniot 状态方程和 高达 27 GPa 的纵向声速(C₁),研究了冲击诱导下的单晶石英的部分非晶化和熔融石英中的非晶-非晶相 变。我们观察到单晶α石英在 15 GPa 的压力下进入混合相区域时,发生密度激增和纵波速度的异常下 降,这件随着单晶石英在冲击加载阶段的部分非晶化。在~5 GPa 附近观察熔融石英的 C₁ 出现明显软化。 其无定形转变压力明显高于静态压缩条件下的转变压力(2-3GPa)^[12],但是与高应变率下的理论预测 相符^[9]。我们的结果表明:(1)冲击压缩条件下,单晶石英在 15 GPa 下发生部分非晶化,石英非晶态 的形成可以被认为是其亚稳态高压相的前驱体结构。高压相的形成最终取决于压缩过程中施加的时间、 热量和压力。这可能是晶体石英沿不同路径出现多个亚稳态高压相的根本原因^[8,11]。(2)高应变率限制 了熔融石英中 Si-O-Si 的旋转,使其发生无定形转变和配位数增加。从而导致了不同的应变率下熔融石 英的相变路径差异。这些发现为 SiO₂中相变对应变率的高度依赖提供了见解^[13-15],弥合了理论模拟和 实验之间的差距。

关键词: 石英、冲击压缩、非晶化、相变动力学、应变率

参考文献:

[1]Canup R M and Asphaug E 2001 Nature 412 708

[2]Albarède F 2009 Nature 461 1227

[3]Bohor B F, Foord E E, Modreski P J and Triplehorn D M 1984 Science 224 867

[4]Berryman E J, Winey J M, Gupta Y M and Duffy T S 2019 Geophysical Research Letters 46 13695

[5]Duffy T, Madhusudhan N and Lee K K M 2015 Treatise on Geophysics pp. 149-178

[6]Hu Q Y, Shu J F, Cadien A, Meng Y, Yang W G, Sheng H W and Mao H K 2015 Nature Communications 6 6630

[7]Tracy S J, Turneaure S J and Duffy T S 2018 Phys Rev Lett 120 135702

[8]Tracy S J, Turneaure S J and Duffy T S 2020 Science Advances 6 eabb3913

[9]Hasmy A, Ispas S and Hehlen B 2021 *Nature* **599** 62

[10]Tracy S J, Turneaure S J and Duffy T S 2020 arXiv (USA) 32 pp.

[11]Otzen C, Liermann H-P and Langenhorst F 2023 Nature Communications 14

[12]Weigel C, Mebarki M, Clement S, Vacher R, Foret M and Ruffle B 2019 Physical Review B 100 094102

金属材料动态损伤破坏: 辐照缺陷和复杂加载条件的影响机理与理 论模型

周婷婷、赵福祺、张倩、何安民、王裴

北京应用物理与计算数学研究所 Email: zhou_tingting@iapcm.ac.cn

摘要:

强冲击下金属材料的动态损伤破坏,是高速撞击、惯性约束聚变、内爆压缩等国防工程领域极为关 心的问题。长期辐照环境下,因级联损伤,金属材料内部会出现大量纳米尺度氦泡,成为辐照金属材料 微结构的显著特征,进而对强动载下材料的动态破坏行为产生影响。另一方面,由于实际工程结构特点, 金属材料往往经历了多次冲击加卸载历程,引起层裂-再压缩-二次层裂的复杂损伤演化。上述问题源 自于重要军事需求,也为极端条件下材料动态损伤破坏研究赋予了新的内涵,已成为当前爆炸力学、冲 击动力学等学科领域的前沿热点。本报告介绍了作者针对上述问题开展的基础创新工作。针对含氦泡金 属的动态损伤破坏,通过分子动力学模拟,发现动态拉伸过程中氦泡的膨胀与汇合是诱发损伤破坏的重 要新途径,并且氦泡损伤机制对传统的孔洞成核-增长有明显的抑制作用;进一步探究了拉伸应变率、 压力、温度、氦泡浓度、晶界等因素对损伤断裂的影响规律,揭示了不同条件下氦泡膨胀与孔洞成核-增长的竞争协同关系:在经典孔洞增长模型基础上,构建了考虑氦泡因素的动态损伤理论模型,并应用 于流体动力学程序,给出了与实验相符的模拟结果。针对多次冲击下的层裂再压缩行为,通过分子动力 学模拟,揭示了首次层裂损伤区在二次冲击下的孔洞塌缩机制、微结构演化特征和热力学量演化规律, 获得了首次损伤状态、二次冲击强度和时间间隔的影响规律,发现了二次损伤阈值和层裂强度显著降低 及其关键影响因素: 在孔洞成核-增长模型基础上, 建立了描述再压缩过程中孔洞塌缩和二次层裂过程 中孔洞成核的理论模型。研究成果为重要工程研究提供了关键机理认识和模型基础。 关键词:动态损伤破坏,辐照缺陷,复杂加载,金属,微观机制,理论模型 参考文献:

- 1. T. T. Zhou*, W. Y. Zhang, F. Q. Zhao, A. M. He, P. Wang, The spallation characteristics of polycrystalline aluminum with helium bubbles under a wide range of shock stresses, J. Appl. Phys. 137, 035901 (2025)
- Q. Zhang, A. M. He*, F. Q. Zhao, T. T. Zhou,* P. Wang, Understanding the spall behaviors of single crystalline aluminum under double decaying shock loadings: Atomistic simulations and theoretical models, European Journal of Mechanics / A Solids, 105, 105237 (2024).
- T. T. Zhou*, Q. Zhang, J. W. Yin, A. M. He, P. Wang, Atomistic understanding of the influences of defects on the spall damage of aluminium under multiple shock loadings, J. Appl. Phys. 133, 015901 (2023)

冲击波加载条件下先进金属材料的孪生行为

张帆^{1,2},任宇³,李泽洲^{1,2},陈明伟⁴,程兴旺^{1,2}

(1. 北京理工大学材料学院;

2. 北京理工大学冲击环境材料技术重点实验室;

3. 北京理工大学机电学院;

4. 约翰霍普金斯大学材料科学与工程学院以及霍普金斯极端环境研究所,马里兰)

Email: fanzhang@bit.edu.cn

摘要:镁合金和多主元合金材料在新一代装甲防护领域具有潜在应用前景,装甲材料通过塑性变形吸收 掉反装甲武器的动能达到防护目的,而孪生变形是一种重要的塑性变形机制,理解冲击波作用下镁合金 和高熵合金的孪生行为对于预测两种先进金属结构材料的动态力学行为并最终设计出下一代装甲具有 重要意义。主要研究结果如下:

(1) 镁合金:发现了AZ31镁合金的冲击波强化效应弱于准静态加载引起的加工硬化效应这一新现象, 并提出了冲击波作用下镁合金的孪生-退孪生行为模型;利用原子分辨率透射电子显微镜技术研究了 Mg-Zn-Y镁合金中{1012}孪晶与长周期有序结构(LPSO)相的交互作用,作用模式取决于LPSO相厚度 与LPSO厚度/孪晶厚度比。

(2)多主元合金:揭示了冲击波加载条件下变形模式演变: CrCoNi合金从低压堆垛层错到中压孪晶以及高压面心立方结构(FCC)到密排六方结构(HCP)相变的压力相关变形模式。原子尺度表征表明,变形模式的序列是由变形前沿90°和30°Shockley分位错的协同作用控制的,这得益于多主元合金的低层错能和压力相关相稳定性。进一步在CrMnFeCoNi合金冲击波加载的孪晶前沿亦观察到位错的协同行为,验证了FCC多主元合金中协同变形模式的普适性。

关键词: 镁合金; 多主元合金; 冲击波; 孪生行为



图 1 (a) 孪晶前沿表明 1 个 90° Shockley 分位错分布在 2 个 30° Shockley 分位错之间。(b) 从低压 层错、中压变形孪晶到高压 FCC 再到 HCP 转变的依次变形模式的示意图。孪晶前沿由一系列 Shockley 分位错组成并在高压下启动向 HCP 的转化。

参考文献

- Fan Zhang, Yu Ren, Zhiqing Yang, Huhu Su, Zhen Lue, Chengwen Tanc, Hailong Peng, Kentaro Watanabe, Bin Li, Matthew R. Barnett, Mingwei Chen. Acta Materialia 188 (2020) 203.
- F. Zhang, Y. Ren, Z. Pei, Q. Gao, Z. Lu, B. Wang, Y. Xue, X. Cao, K. Du, Y. Yang, B. Li, X. Cheng, M. Chen, Cooperative dislocations for pressure-dependent sequential deformation of multi-principal element alloys under shock loading, Acta Mater. 276 (2024) 120150.

强冲击下微喷颗粒的形成、输运、破碎与转化

王欣欣, 伍鲍, 鲍强, 孙海权, 何安民, 王裴

北京应用物理与计算数学研究所 Email: xxwang14b@alum.imr.ac.cn

摘要:

强冲击下,金属界面初始微缺陷扰动引起失稳破碎,产生高速颗粒态物质向外喷射。微喷射是跨尺 度、多机制的复杂动力学过程。微喷颗粒在高温高压高收缩比条件下进一步发展演化,与气体发生混合, 影响装置性能。该问题一直是实际工程应用中极为关注的重点和难点问题。微喷问题的复杂性体现在以 下几个方面:1)强度效应会抑制扰动增长,影响射流断裂破碎形态、还涉及到熔化与相变等复杂因素 影响:2)冲击波形:实际加载波往往是带有稀疏卸载的加载波形,会导致射流破碎与微层裂破碎耦合 演化,使得界面破碎现象更加复杂:3)多次冲击作用:实际工况中的复杂多次冲击加卸载导致微喷总 量与分布的理论预测更加困难,二次冲击后会引入复杂的破坏现象;4)颗粒尺度:微喷破碎颗粒尺度 受应变率、强度、初始扰动尺度影响,破碎后的颗粒粒径会进一步影响后续两相流混合过程;5)化学 反应:形成的活泼金属微喷颗粒在高温高速反应气体流场中流动,会导致剧烈温升与颗粒破碎,物理过 程复杂、影响因素多。本报告将结合微观、宏观等不同尺度数值模拟方法,介绍强冲击下微喷颗粒的形 成、输运、破碎与转化全过程的物理机理与理论模型。本研究一方面将服务于重大工程需求,同时也将 为极端条件下材料破碎与演化问题研究提供可靠的理论依据。

关键词:强冲击,微喷形成,界面失稳破碎,微喷射,微层裂,理论研究

444

二次非稳态冲击下含氦泡金属铜界面动态破坏的分子动力学模拟

鲍强1、王欣欣1,*、邵建立2、何安民1、王裴1,*

1 北京应用物理与计算数学研究所 北京 100094
2 北京理工大学机电学院 北京 100081

* Email: xxwang14b@alum.imr.ac.cn

摘要:

航空航天、惯性约束聚变等工业领域,金属材料往往受到二次或多次冲击载荷作用,其动态力学响 应得到了国内外研究者的广泛关注。已有研究表明,冲击波经金属界面反射卸载后,易诱发微喷、层裂 等复杂界面破坏现象,成为制约惯性约束聚变点火效率提升的关键因素。此外,处于核电站等辐照环境 的金属材料,其内部会形成氦泡等微观结构缺陷,对材料力学性能产生显著影响。由于氦泡尺寸通常处 于纳米量级,现有实验技术难以对其动态演化过程进行原位实时观测。本研究以辐照条件下的金属铜为 研究对象,运用分子动力学模拟方法,揭示了复杂加载下,氦泡缺陷对金属铜动高压力学响应的影响规 律。研究发现,首次三角波冲击卸载引发的氦泡膨胀-汇合行为,对二次方波加载下金属材料界面破坏 具有重要影响。一方面,三角波冲击卸载后,氦泡膨胀形成的微层裂损伤区域与首次冲击产生的尖钉-气泡结构相互耦合,加剧了二次冲击时界面非规则 Richtmyer-Meshkov (RM)不稳定性,致使表面微 喷颗粒质量显著增加;另一方面,二次冲击过程中,随机分布的氦泡发生塌缩闭合,促使金属材料近表 面区域局部温度升高,加速铜基体熔化,进而削弱材料强度及对氦泡的束缚能力。由此,二次冲击后氦 泡膨胀效应进一步增强,加剧了金属铜的表面破坏。

关键词: 氦泡, 二次非稳态冲击, 界面破坏, 分子动力学模拟

参考文献

- Qiang Bao, Bao Wu, Xin-Xin Wang, Haonan Sui, Hua Y. Geng, Jian-Li Shao, Hai-Quan Sun, An-Min He, Pei Wang. Molecular dynamics investigation of unsupported double-shock induced micro-jet behaviors in copper containing helium bubbles [J]. Physics of Fluids, 2024; 36 (11): 112101.
- Qiang Bao, Haonan Sui, Bao Wu, Xin-Xin Wang, Qi Zhu, Jian-Li Shao, An-Min He, Pei Wang. Near-surface fragmentation in irradiated copper under two successive shock loading: effects of local temperature re-distribution and helium bubble expansion [J]. Materials & Design, 2025: 114013.

基于机器学习势的碳化硼陶瓷力学行为与机理研究

李君¹, Qi An², Kun Luo²

¹新材料力学理论与应用湖北省重点实验室, 武汉理工大学, 武汉, 430070, 中国 ²Department of Materials Science and Engineering, Iowa State University, Ames, IA, 50011, United States

碳化硼(B₄C)陶瓷凭借高强度、高硬度、低密度等优异的物理力学性能,被广泛用于 国防军工和航空航天等领域,在防护装备向轻量化和高性能的发展中发挥着关键作用。然而 实验表明,一旦冲击压力超过 B₄C 的 Hugoniot 弹性极限,其内部会出现纳米级局部非晶带, 导致其剪切强度突然软化,严重制约了其实际应用。为此,我们采用了"第一性原理计算— 机器学习势构建一分子动力学模拟"的多尺度研究方法,从原子一分子尺度系统揭示了 B₄C 局部非晶化的本征机理,提出了增强其延展性的有效策略,为设计制备高性能轻量化陶瓷防 护材料提供了理论指导。首先,利用第一性原理方法从原子尺度研究了 B₄C 的力学行为,阐 明了硼笼结构破坏是导致其局部非晶化的本征机理。其次,基于第一性原理计算构建训练数 据集,通过深度神经网络,建立了 B₄C 的高精度机器学习势,采用分子动力学模拟了 B₄C 的 剪切变形行为和冲击动态力学响应,揭示了其局部非晶带的形成机理,成功解释了长期争议 的 B₄C 冲击 Hugoniot 曲线的双线性行为。最后,提出了原子掺杂、纳米孪晶、晶粒细化、 空位缺陷调控等性能优化策略,证实这些方法可显著抑制 B₄C 的局部非晶化并有效提升其室 温延展性。

分子流体冲击致冷效应的物理机制研究进展

刘福生, M.S.Akram, 范茁宁, 杨雷, 袁文硕, 李柯苇

西南交通大学高温高压物理研所

Email: fusheng_l@163.om

1986年, Radousky 等人^[1]在测量液氮冲击辐射温度时发现经第一次冲击加载的分子流体受到来自 光学窗口反射波再冲击加载时其辐亮度和温度均呈现大幅度降低,即所谓的"冲击致冷"现象^[2]。通过 比较分析氟化锂和蓝宝石单晶窗口的再冲击加载效果后,他们认为冲击致冷效应的物理机制是分子流体 发生离解相变。据此,他们基于分子间相互作用势模型构建了氮流体的高温高压状态方程,并对冲击致 冷效应给出了物理解释[3]。随着第一性原理分子动力学模拟能力的大幅提升,人们对氮的状态方程及离 解相变问题进行更深入研究,发现氮的"冲击致冷"效应竟然无法从理论模拟角度复现出来的,并由此 引发了关于"冲击致冷"物理机制的争论。Chen 等人[5]及 Zheng 等人[6-7]在多次冲击加载氩气和氙气时 也观测到流体/窗口界面发生类似的"冲击致冷"现象。Li 等人¹⁸采用 CHBR3 作光源研究光学窗口消光 特性时也观测到类似现象。在这些体系中,作者将该现象归因于光学窗口的透明性变差或界面的热弛豫 效应[6-9]. 目前主流观点包含以下几点: (1) 在瞬态的高温高压条件下窗口表层可能处于熔融态, 且该状 态的窗口材料对来自样品的热辐射具有消光效应,即熔化消光机制:(2)再冲击高压引起了样品材料的 化学反应,即结构相变机制;(3).样品材料与窗口之间的热传导效应,即界面热弛豫机制^{[8].[9]}。本文 研究了具有不同化学活性分子流体(CHBr₃, N₂, O₂, CO)与惰性液态氩(LAr)与LiF光学窗口界面的冲击 辐射行为和辐射温度变化特征。我们建立了具有视频监测能力的低温靶系统,确保低温分子液体制备过 程和初始状态的可重复性;采用的多通道辐射高温计系统在进行光电转换过程中具备长时间稳定放大能 力,确保了对冲击加载和卸载过程样品辐射特性的高保真观测能力。在较宽的温度和压力范围为解决上 述争议提供了更丰富的观测数据。结果表明,在相同的冲击压力区间,这些流体介质/LiF界面辐射特 性呈现出明显不同的演变特征,表明界面冲击致冷效应与流体介质元素组成及其产物的化学活性密切相 关,因此,本文观测结果强烈支持界面冷却效应由流体自身冲击响应所致,而不支持热传导机制和窗口 熔化消光机制。我们认为在分子流体中冲击波剖面特征可能反映出冲击相变和化学反应动力学行为,需 要更大计算资源才能合理模拟复现。本文研究结果对分子流体冲击相变和爆轰产物状态方程研究具有重 要意义,同时对非透明材料辐射测温技术也具有一定参考价值。

关键词:分子流体;冲击加载;辐射测温;冲击致冷;

[1] Radousky H B, Ross M, Nellis W J, et al. Molecular dissociation and shock-induced cooling in fluid nitrogen at high densities

and temperatures[J]. Phys. Rev. Lett, 1986, 57(1): 2419.

[2] Radousky H B, Ross M. Shock-induced cooling in high-density fluid nitrogen[J]. Int. J. High Press. Res, 1988, 1(1): 39-52.

[3] Nellis W J, Ross M, Holmes N C, et al. Equation-of-state, shock-temperature, and electrical conductivity data of dense fluid nitrogen in the region of the dissociative phase transition[J]. J. Chem. Phys, 1991, 94(3): 2244-2257.

[4]Lindsey R K, Bastea S, Lyu Y, et al. Chemical evolution in nitrogen shocked beyond the molecular stability limit[J]. J. Chem.

Phys, 2023, 159(8): 084508.

[5] Chen Q F, Zheng J, Gu Y J, et al. Thermophysical properties of multi-shock compressed dense argon[J]. J. Chem. Phys, 2014,

140(7):

[6] Zheng J, Chen Q F, Gu Y J, et al. Multishock Compression Properties of Warm Dense Argon[J]. Sci. Rep, 2015, 5(1): 16041.

冲击压缩条件下材料相变的判据——黏性

马小娟、曾重阳、刘福生

西南交通大学物理科学与技术学院 Email: mxj swjtu@126.com

摘要:

高温高压条件下材料的黏性是分析其动力学行为的重要物性参数之一。作者团队利用飞片碰撞扰动 方法测量了扰动冲击波在样品中的演化规律,结合二维欧拉数值分析,得到金属铝、铁、铜和锡在冲击 高压下的等效黏性,结果发现其等效剪切黏性值约 10~10³Pa·s,对材料的结构较为敏感。

以多相区的金属锡为例,在 25-75 GPa 压力范围内,其黏性值随压力的变化成 M 形变化规律,如 图所示:在固相区,整体上随冲击压力不断增大,等效黏性值从 90 Pa·s 增大到 1980 Pa·s;而当进入液 相区,即 P=75GPa 时,等效黏性值迅速降低为 310 Pa·s;在固相临界区(bco+bcc→bcc 和 bcc→固液混 合区),也出现了黏性值的回调。比较金属锡剪切模量^[1-2]和屈服强度^[2]随冲击压力的变化规律,二者及 具相似性。

显然金属锡的等效剪切黏性值和其剪切模量和屈服强度均对材料的结果异常敏感,所以高温高压条件下材料黏性变化规律也可用于判别材料的相变。



图1 金属锡的等效剪切黏性系数(左)、剪切模量和屈服强度(右)随冲击压力的变压规律

关键词: 等效黏性; 相变(中文, 宋体五号字, 其中英文和数字为 Times New Roman 五号字) 1.Song P, Cai L, Tao T, et al. Melting along the Hugoniot and solid phase transition for Sn via sound velocity measurements[J]. Journal of Applied Physics, 2016, 120(19): 195101.

2. Hu J, Zhou X, Dai C, et al. Shock-induced bct-bcc transition and melting of tin identified by sound velocity measurements[J]. Journal of Applied Physics, 2008, 104(8): 083520.

水下爆炸近场冲击波与多相界面相互作用过程研究

徐维铮

中国工程物理研究院流体物理研究所

xuweizheng@whut.edu.cn

诊断物理图像是认识和揭示物理规律的重要前提,本研究克服了水下水层厚度对照明光 源强度的极剧衰减、照明强度与相机高幅频、短时曝光的匹配等难题,发展了水下爆炸冲击 波传输及其与多相界面相互作用大背景流场纹影技术,清晰地再现了水下爆炸近场冲击波传 输、近场冲击波与气液界面、刚性固液界面以及柔性固液界面相互作用过程中的关键毁伤效 应物理图像;诊断的物理图像将为水下爆炸数值模拟算法校验、理论模型构建、毁伤效应机 理研究提供重要的参考和依据。

基于超临界二氧化碳膨胀的模拟爆炸加载试验技术

姚术健

中南大学

yaoshujian@126.com

结构的爆炸冲击加载技术是动高压科学的一个重要方向。超临界二氧化碳(sCO2)凭 借相变强膨胀特性,为安全模拟爆炸冲击提供了新技术途径。报告将系统介绍 sCO2 作为激 波管驱动源的模拟爆炸加载技术。首先,介绍相关试验装置研制与试验研究,结果表明 sCO2 作为激波管动力源,可以实现高冲击压力峰值、长正压作用持续时间的模拟爆炸加载效果; 然后介绍数值仿真工作,结合用户自定义材料参数(UDGRM)和用户自定义方程(UDF), 在 ANSYS Fluent 中构建含真实气体参数的数值模型,相比于理想气体方程、PR 方程和 RKS 方程,使用双线性插值的 UDGRM 具有更高的仿真精度;其次,研究了激波管几何参数(如 收缩段与扩张段设计)及入口条件(如质量流量与温度)等对冲击波峰值与脉宽的影响和规 律。

等熵与冲击加载路径下的多晶塑性本构

杨舒晴1、刘桂森1、胡建波2、俞宇颖2、祝文军2、沈耀1,*

1. 上海交通大学材料科学与工程学院,上海 200240;

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理重点实验室,四川绵阳

621999

Email: yaoshen@sjtu.edu.cn

摘要:

材料的动态屈服显著依赖于加载路径,其中应变率效应、非线性热弹性及微结构演化是决定不同动 高压加载条件下力学响应的关键因素。等熵加载与冲击压缩作为两种典型的高应变率加载方式,其热力 学路径与材料内部耗散机制存在本质差异:等熵加载过程中压缩波以简单波形式传播,被加载材料的熵 增和温升很小,能够使样品从初始状态连续地加载到终态;而冲击加载伴随强间断冲击波,波阵面处不 可逆耗散会导致显著温升。为揭示不同热力学路径下材料屈服机制及微结构演化规律,发展了一套耦合 非线性热弹性本构、宽应变率位错动力学及晶界效应的三维晶体塑性有限元模型,系统对比了多晶铝在 两种加载模式下的宏-介观响应差异。研究表明不同压力下,两种路径下屈服强度、温升、温升的贡献 来源存在显著差异。等熵加载下材料呈现典型应变硬化特征,屈服强度随压力升高呈线性增加,而冲击 加载路径下屈服强度随压力升高呈现先强化后弱化的非线性响应。温度演化差异是导致两种路径下强度 差异的主要因素,等熵加载下的温升主要来源于弹性变形功贡献,而冲击加载时黏性耗散引起的温升占 比明显增加,导致显著的热软化效应。除了定量分析力学参数与内变量的差异外,模型还可以可视化给 出不同内变量的空间分布,可用于研究揭示位错演化、晶界效应与局部温升的相互作用机制。本研究构 建的数值模型成功实现了从位错运动到宏观响应的跨尺度关联,能够预测复杂加载路径下的材料微观结 构响应与宏观力学行为,对抗冲击材料设计、高能效加工工艺优化具有重要理论指导价值,同时为极端 条件下材料动态本构建模提供了有力的可视化数值工具。

451



图 1 (a)等熵/冲击加载路径下屈服强度演化对比,H:冲击加载 S:等熵加载 (b)等熵/冲击加载路径下温 升对比 (c)冲击加载温升分解,Te:弹性温升 Tp:塑性温升 Td:黏性温升 (d)等熵加载温升分解,Te:弹性 温升 Tp:塑性温升 Td:黏性温升



图 2 多晶铝冲击加载(Pmax ~ 80GPa)数值模拟: (a)冲击加载模型示意简图 (b)背应力的空间分布 (c)塑 性温升空间分布 (d)Mise 应力的空间分布

关键词: 等熵加载,冲击加载,温升,动态晶体塑性本构,屈服强度

复杂路径加载下物质宏-介-微观多尺度研究技术

<u>贺芝宇</u>^{1,2}、黄秀光¹,贾果¹,舒桦¹,涂昱淳¹,方智恒¹,张帆¹,刘海风²,

张其黎², 李凯², 熊俊¹, 陈森³, 王伟¹, D. Kraus⁴, 傅思祖¹

1中国工程物理研究院上海激光等离子体研究所
2中国工程物理研究院北京计算数学与应用物理研究所
3中国工程物理研究院流体物理研究所

4Universität Rostock

Email: hezy1213@foxmail.com

摘要:

材料在极端高压条件下的状态方程、物性及相变研究是凝聚态物理与行星科学领域的核心科学命题。基于激光驱动加载技术,实验室已实现 TPa 量级压力、万 K 温区及飞秒-微秒时间尺度的极端状态模拟,为揭示高压、高应变率条件下物质行为提供了独特研究平台。随着大型激光装置与先进 X 射线诊断技术的发展,极端条件下材料动态响应研究不仅深化了温稠密物质物理认知,更为天体物理、惯性约束聚变等重大应用领域提供关键科学支撑。发展多尺度协同的原位诊断技术,建立多手段联合探测体系,已成为构建极端物质完整物理图像的核心突破口。

本研究系统构建了基于激光驱动平台的多尺度诊断技术体系:宏观尺度突破动高压条件下速度、温 度、压力的瞬态精确测量瓶颈;介观尺度实现微结构演化的原位动态追踪;微观尺度揭示晶格动力学的 超快响应机制。通过集成冲击/准等熵加载与静动复合加载技术,在高压状态方程基准建立、超离子水 物性解析及碳基材料相变动力学等方向取得系列进展。进一步提出大型激光装置多诊断技术协同实施方 案,该研究范式为动态加载下材料物理过程的系统解析提供新途径,对极端条件物质科学研究具有重要 方法论意义。

关键词:动态原位诊断;激光准等熵加载;静动复合加载;X射线衍射;小角X射线散射

参考文献

- 1. Zhiyu He#, Qili Zhang#, Haifeng Liu, et al., Physical Review B 103, 134107, 2021
- 2. Zhiyu He, Melanie Rödel, J. Lütgert, et al., Science Advances, 8(35), 2022
- 3. Zhiyu He, J. Lütgert, M. G. Stevenson, et al., High Power Laser Science and Engineering, 12, e46, 2024
- 4. Zhiyu He, Xiuguang Huang, Hua Shu, et al., Chinese Journal of High Pressure Physics, 37(5), 2023
纵向气隙影响下不同类型炸药爆轰输出性能的对比研究

郭文灿、黄文斌、裴红波

中国工程物理研究院流体物理研究所

Email: guowencan1984@163.com

摘要:为了研究装药结构中纵向气隙对炸药爆轰输出性能的影响,本文开展了 HMX 基及 TATB 基炸药 爆轰正向作用下的见证板实验,获得了不同炸药类型及不同宽度气隙影响下金属见证板的损伤情况。图 1 分别给出了 HMX 基和 TATB 基炸药在多种气隙宽度下的凹坑图像、裂口形貌及剖面图像。图 2 为两 类炸药实验中见证板剖面轮廓曲线及中心裂口的典型特征尺寸。由图可知,相比更敏感、爆压更高的 HMX 基炸药: 1、TATB 基炸药附带损伤情况更为严重,同气隙规格下裂口宽度及面积都更大; 2、两 类炸药造成的见证板损伤剖面有明显区别,HMX 基炸药射流形成的裂口较为窄和尖锐,TATB 基炸药 形成的裂口则宽和圆滑; 3、HMX 基炸药见证板剖面轮廓中两侧区域高度重合,只有中间区域受到射 流侵蚀的影响,TATB 基炸药见证板剖面整个区域都明显受到射流侵蚀的影响,剖面轮廓曲线的整体深 度随着气隙宽度增加逐渐降低,纵向气隙对其爆轰输出性能影响显著。



图1 见证板实验中底部凹坑的正面及剖面图像



图 2 凹坑剖面轮廓曲线(左)及裂口面积(右)对比 **关键词:** 炸药、裂纹、爆轰、见证板、气隙

复合壳体装药抗殉爆防护结构优化设计

何杨,李金河,李涛,傅华

中国工程物理研究院流体物理研究所 Email: heyang0820@163.com

摘要:

近年来,在遭遇导弹袭击或者在邻近弹药意外爆炸时,装药很容易在破片和冲击波的耦合作用下发 生殉爆事故,引发连锁爆炸反应,导致弹药库或者相应的作战平台被摧毁。在不改变战斗部威力的情况 下,通过对带壳装药外防护结构进行优化设计,降低弹药在殉爆场景下的反应等级,这对提高弹药在运 输、存储和使用过程中的生存能力具有重要意义。为了研究复合壳体装药抗殉爆防护结构优化设计,本 文采用了试验和数值模拟方法研究获得了复合壳体装药爆炸近场威力场特性,并通过数值模拟方法分析 了防护结构材料、厚度以及排列顺序对复合壳体装药抗殉爆能力的影响,并进行了试验验证,研究结果 表明,在弹药爆炸近场范围内,冲击波阵面峰值压力最高为几十兆帕,而破片速度可达 2000 m/s 以上, 高速破片群撞击可能是导致复合壳体装药发生殉爆响应的主要原因;增加凯夫拉和聚脲材料将提升复合 壳体的抗侵彻能力,且改变凯夫拉和聚脲排列顺序将也影响壳体结构防护能力,计算得到复合壳体装药 的最优抗殉爆防护结构方案为 1.5 mm 铝+6 mm 钨球+3 mm 聚脲+3 mm 凯夫拉+1.5 mm 铝。



图 1 不同防护结构下装药入射压力

关键词:复合壳体;殉爆;防护结构设计;爆炸特性;破片载荷;冲击波载荷

Competition in phase transformation pathways under shock compression revealed the abnormal phase boundary shifts

<u>李江涛</u>、徐亮,王倩男,杨靖,周孟阳,陈森,胡建波 中国工程物理研究院流体物理研究所 Email: jianbo.hu@caep.cn

摘要: The deviation of the phase transition pressures from the static/equilibrium phase boundary is an interesting topic in the fields of high pressure science and dynamic responses of materials. The equation of state, constitutive relations, damage development of materials will be inherently influenced by the abrupt change in the crystal structure, causing unpredicted responses of materials in the following sequential processes. From this perspective, it is required to make clear the underlying mechanisms governing the shift of dynamic phase transition pressures with respect to the static/equilibrium phase boundary. Usually, the nucleation and growth of the new phase requires a finite time period, resulting in a delay in the structural response of materials under external stress, that is, the observed phase transition pressure is larger upon compression and lower upon decompression with respect to the static/equilibrium phase boundary. However, abnormal phase boundary shifts were found in bismuth and antimony, in which the observed phase transition pressure is lower upon compression, which cannot be explained by the simple nucleation scenario. In this work, the competition in phase transformation pathways was proposed to explain this abnormal phase boundary shift as well as the normal one, which reveals complexities of phase transformation kinetics in dynamic high pressure sciences.

关键词: Ultrafast X-ray diffraction; shock compression; phase transformation kinetics; nucleation model

TATB 基 PBX 炸药冲击起爆温度和密度效应研究

李淑睿、郭文灿、张旭、舒俊翔、傅华

中国工程物理研究院流体物理研究所,四川 绵阳 621999 Email: shurui li@163.com

摘要:

由于 TATB (三氨基三硝基苯)炸药具有良好的安全性能,以 TATB 炸药为主要组分的钝感 PBX 炸药在武器弹药中被广泛应用。研究发现,TATB 基 PBX 炸药的冲击波感度与其所处的环境温度紧密 相关,低温环境下可能因冲击波感度降低而无法正常起爆,高温环境下则可能因冲击波感度升高而发生 意外点火甚至爆炸。考虑到环境温度改变会同时引起炸药密度变化,但目前对于这种密度改变在炸药冲 击起爆温度效应中的作用仍缺乏认识,因此有必要开展宽温域内的炸药冲击起爆温度和密度效应研究, 深入认识环境温度对炸药冲击起爆响应的影响机制。

针对宽温域内温度和密度变化对 TATB 基 PBX 炸药冲击起爆特性的影响,本文首先设计建立了基 于冷热辐射原理的高低温加载实验装置,通过增大温度辐射面积、全封闭式辐射温控,实现了真空环境 下炸药样品-55℃~70℃宽范围环境温度的精确控制,控温精度约为±0.2℃,样品温度均匀性可达±2℃。 在此基础上,利用火炮驱动飞片冲击加载和组合式电磁粒子速度测速技术,本文获得了不同初始温度 (-55℃~70℃)和初始密度(1.88 g/cm³~1.90 g/cm³)下 TATB 基 PBX 炸药的冲击起爆成长实验数据。 此外,通过在 Davis 炸药状态方程中引入孔隙率模型,本文改进建立了具有密度适应性的温度相关炸药 冲击起爆反应流模型,能够同时反映初始温度和初始密度变化对炸药冲击起爆成长过程的影响,进而解 耦研究了由初始温度变化引起的密度改变对炸药冲击起爆响应的影响。研究结果表明,改进建立的反应 流模型具有较好的温度和密度适应性,不同温度和密度条件下的模型计算结果均与实验数据吻合较好, 且无需调整模型参数。此外,与高温环境相比,低温环境下炸药密度变化对冲击起爆成长的影响更为显 著,这可能是导致同等温度变化幅度下,TATB 基 PBX 炸药在低温环境下的冲击波感度变化更为迅速 的重要原因之一。上述研究成果有助于深入认识环境温度对炸药起爆响应的影响机制,并为宽温域内 TATB 基 PBX 炸药的冲击起爆响应预测,以及钝感炸药的安全性和可靠性评估提供重要参考。

关键词: TATB; 冲击起爆; 初始温度; 初始密度; 反应流模型

457

冲击压缩下单晶 Mg0 的各向异性弹-塑性转变研究

刘勋¹、真下茂²

¹武汉理工大学物理与力学学院 ²熊本大学脉冲功率研究中心 Email: xun liu@whut.edu.cn

脆性材料在单轴应变条件下的弹-塑性转变机制问题一直是冲击波物理研究中的热点。本研究中我 们测量了 35 GPa 压力范围内 MgO 单晶沿<100>和<110>晶向加载的雨贡纽弹性极限(HEL)。实验结果 表明,<100>方向加载的 HEL 为 3-5 GPa,而<110>方向加载的 HEL 为 10-15 GPa,这一差异可以使用 施密德定律来解释。特殊的是,沿<110>晶向加载时实测粒子速度剖面出现三波结构,经分析后我们认 为这一现象可能是由滑移系的变化引起的^{1,2}。进一步的,我们使用高速摄影机原位实时观察了 MgO 单 晶沿不同晶向加载时的变形过程,实验结果初步支持上述推测。

参考文献

- Liu X, Mashimo T, Ogata K, et al. Anomalous elastic-plastic transition of MgO under shock compression. Journal of Applied Physics, 2013, 114(24).
- 2. Liu Q, Zhao F, Zhou X. Optical emission of shocked magnesium oxide single crystals: Heat-conduction and orientation effects. Journal of Applied Physics, 2021, 130(7).

轻质金属多孔夹芯结构的弹道极限行为

秦庆华 1, 崔天宁 1,2

 西安交通大学复杂服役环境重大装备结构强度与寿命全国重点实验室,极端环境服役 性能与防护技术西安市重点实验室,陕西 西安 710049

2. 中国兵器工业第 203 研究所, 陕西 西安 710065

Email: qhqin@mail.xjtu.edu.cn

摘要:

金属泡沫夹芯结构是一种兼具轻质、高比强度、高比刚度、抗冲击、减振降噪、高可设计性等优点 的轻质多孔夹芯复合防护结构,多用于航天航空、国防军工、交通运输等领域。由于其服役环境恶劣, 极易受到外来物体的高速侵彻破坏,因此探究该结构的弹道极限行为及其优化设计思路是扩大其工程应 用前景的重要基础。利用热压成型工艺设计并制备了具有不同面板质量分布和金属泡沫芯材梯度分布的 金属泡沫夹芯结构,开展了该种结构受高速弹体侵彻的实验、数值模拟和理论研究工作,考虑了弹体形 状、入射速度、入射角度、面板和芯材质量分布等因素的影响,获得了锥头、平头及球头弹体的入射速 度、剩余速度以及金属泡沫夹芯结构被贯穿后的典型破坏形貌等重要实验数据;基于 CT 扫描提出了多 孔材料真实细观结构高精度重构方法,建立了金属泡沫夹芯结构跨尺度弹道侵彻数值模型,获得了不同 弹体侵彻金属泡沫夹芯结构的物理过程和破坏机制,阐明了后面板出现不同失效模式的原理,发现了弹 靶间接触力随冲击工况的模式转变规律,并进一步提出了金属泡沫夹芯结构质量梯度设计策略;基于实 验和数值计算结果,发展并丰富了金属泡沫夹芯结构的弹道侵彻理论,建立了弹体冲击金属泡沫夹芯结 构的多阶段侵彻理论模型,通过计算金属泡沫夹芯结构各部件损伤失效所耗散的弹体动能,可获得弹体 最终剩余速度,与实验结果吻合较好。

关键词:夹芯结构;金属泡沫;弹道极限;梯度效应;侵彻与贯穿;能量吸收

复杂加载历程下金属动态损伤机理及模型

隋昊男、王欣欣、何安民、王裴

北京应用物理与计算数学研究所 Email: hnsui@pku.edu.cn

摘要:

炸药爆轰或强激光驱动下压缩波在自由面反射形成卸载稀疏波,在金属靶体内部形成拉应力区并导 致的动态拉伸断裂,是惯性约束聚变研究中所关注的重点问题。动态加卸载过程中压力幅值与材料熔化 曲线的关系将决定金属的相态、进而决定其拉伸断裂的演化特征。低压固相情况下将形成损伤集中、形 貌清晰的层裂面;高压熔化情况下将形成由近表面向金属内部发展的连续空化破碎微层裂区。实际工况 中,金属材料将经历多次冲击加卸载历程,首次冲击加卸载后形成的损伤区在再次冲击作用下发生闭合, 由此产生更丰富的物理现象与更难预测的非线性力学行为。作为复杂强动载路径下金属材料经历的重要 物理过程,揭示微层裂-再压缩的微观物理机制、建立基于物理演化规律的理论模型,直接面向聚变装 置研究的重大需求。

本文基于理论建模和数值模拟开展微层裂-再压缩过程中金属动态损伤破坏的规律研究,揭示了损 伤历史对金属材料变形及损伤行为的影响[1]。在机理研究方面,基于微观模拟方法分析了微层裂-再压 缩过程中损伤变量、热力学量的演化规律,获得了微层裂过程中损伤发展及再压缩过程中损伤闭合的细 致物理图像,得到了未损伤态与微层裂-再压实态金属的动态演化响应差异。在理论建模方面,分别提 出了基于孔洞演化视角和熔体演化视角的损伤理论模型,对熔融金属的损伤断裂本质及微层裂-再压缩 过程进行了深入分析,为描述金属损伤演化规律提供了更全面可靠的理论分析手段。



图 1 复杂加载历程下金属的微层裂-再压缩机理及模型

关键词:复杂强动载路径;微层裂及再压缩;损伤机制;分子动力学模拟;理论建模 参考文献

1. Sui, H. N., Wang, X. X.*, Wu, B., Bao, Q., Zhang, F. G., Sun, H. Q., He, A M., Wang, P.*. Cooperative competition between melt-phase and void during micro-spallation and recompression. Int. J. Mech. Sci., 2024, 275: 109276.

含氦泡双晶铜高应变率压缩/拉伸响应研究

朱琪1、邵建立2、王裴1

北京应用物理与计算数学研究所
2.北京理工大学机电学院
Email: 13263365071@163.com

摘要:

金属材料受辐照后形成的氢泡缺陷结构对材料动力学行为具有显著影响。对于多晶材料,实验观测 到氦团簇趋于在晶界处聚集长大,因此,有必要综合考虑晶界与氦泡的耦合效应,对动载荷下材料的动 力学行为及氦泡演化行为开展研究。本项研究基于分子动力学方法,研究单轴压缩/拉伸加载下双晶铜 中氦泡的动态响应,揭示了不同加载方向及氦泡位置的影响规律,以及拉伸过程中两氦泡的汇合机制。 结果表明,不同方向加载下晶粒内部和晶界处氦泡对材料屈服强度的影响存在差异,引起材料压缩/拉 伸不对称性的变化,且该现象在垂直于晶界平面加载时更为显著。晶界-氦泡距离对材料的屈服行为影 响不大,但会影响拉伸后期氦泡的演化。基于分子动力学模拟结果对 Carnahan-Starling 状态方程进行修 正,所得方程较好描述了高应变率压缩和拉伸过程中氦泡的演化。拉伸加载下氦泡的汇合行为与氦泡相 对晶界分布位置、晶界类型和体系温度密切相关。垂直于加载方向分布的氦泡更易发生汇合,且晶界存 在加速汇合过程。此外,含较多结构单元的晶界以及高温能有效促进晶界处氦泡的汇合。



图 1 单轴压缩/拉伸加载下氦泡变形行为

关键词:氦泡;晶界;单轴压缩/拉伸;分子动力学 参考文献

- 1. Qi Zhu, Jian-Li Shao, Pei Wang. The dynamic response of He bubble in bicrystal copper under uniaxial compression and tension[J]. Journal of Nuclear Materials, 2023, 574: 154200.
- Qi Zhu, Jian-Li Shao, Pei Wang. The growth and coalescence of helium bubbles in bicrystal copper under tension[J]. Journal of Nuclear Materials, 2023, 582: 154489.

动态强度超高的金刚石-TiC 复合材料研究

周亮1、贺端威1,2*、郑伟1

1.四川大学原子与分子物理研究所

2. 四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室

*E-mail: duanweihe@scu.edu.cn

摘要:

本研究通过高温高压反应烧结工艺,采用含 TiH₂的金刚石混合粉末和 Ti 包覆金刚石粉 末两种前驱体,成功制备出兼具高断裂韧性(达 11.6 MPa·m^{1/2})的新型金刚石-TiC 复合材 料(简称 DTC)。与此同时,该复合材料在动态强度方面展现出卓越特性。Hugoniot 弹性 极限(HEL)作为评估材料动态强度的重要标准被广泛采用,它代表了材料在冲击压缩破 坏前从弹性到塑性的过渡应力。在这里,本文报道了一种金刚石-TiC 复合材料(~ 11.5wt.% TiC),在 48~195 GPa 的冲击压力下,金刚石-TiC 自由表面的速度分布均呈现单 波结构。此外,对测量的 Us-Up(冲击波速度-粒子速度)关系进行线性拟合,表明在 195 GPa 的冲击压力下,没有弹塑性转变或固-固相转变。金刚石-TiC 复合材料的压缩比与 TiC 相似,但明显高于金刚石。这些非凡的动态响应本质上归因于独特的微观结构,其中金刚 石多晶被包裹在 TiC 基体中,提供了保护。本文的研究结果不仅开发了一种机械可靠、轻 质、高断裂韧性的装甲材料,而且合成成本低,为金刚石复合材料的冲击压缩性能提供了 新的见解。

关键词: 金刚石-TiC; Hugoniot 弹性极限; 装甲材料; 高温高压

参考文献:

 Liang Zhou *et al.*, Diamond-TiC composite with an ultrahigh Hugoniot elastic limit. *Journal of Applied Physics* 133 (2023) 16.

2. K. Katagiri, et al, Shock response of full density nanopolycrystalline diamond. Physical Review Letters 125 (2020) 185701.

3. Zhou Liang *et al.* Heterogeneous diamond – TiC composites with high fracture toughness and electrical conductivity. *Journal of the European Ceramic Society* 44 (2024) 4887-4894.

U-6 wt.% Nb 合金冲击响应的微观机理

王昆

湖南大学材料科学与工程学院 Email: wangk@hnu.edu.cn

摘要:本研究开发了 U-Nb 合金角度依赖势函数,该势函数能准确描述 U-Nb 相图特征。通过非平衡分子动力学(NEMD)模拟,在室温条件下成功揭示了溶质浓度变化引起的α→γ相变以及相变诱导孪晶微观机制,准确预测了 Nb 含量在 0.04~0.85 范围内的混溶间隙。针对 U-6 wt.% Nb 合金(U-6Nb),加热过程中观察到α"→γ相变。通过单晶 U-6Nb 的冲击 NEMD 模拟,发现沿 a/c 轴加载时呈现弹塑性双波结构,其中沿 c 轴加载时弹性波与塑性波几乎重合以致难以区分。而沿 b 轴加载时,弹性前驱波的缺失。研究表明其机理源于α"→γ中间相变过程中冲击诱导的局部原子剪切有序重排所实现的瞬时剪切应力释放。具体的α"→γ相变过程分为两个阶段:(1)(001)_a,沿[100]_a,/[100]_a,方向交替原子重排;(2)(010)_a,沿[100]_a,/[100]_a,方向交替原子重排;(2)(010)_a,沿[100]_a,/[100]_a,方向交替原子重排;(2)

关键词: UNb 合金; 相变; 孪晶; 冲击压缩; 原子机制 参考文献

- 1. Y. Huang, P. Li, S. Yao, K. Wang*, W. Hu*, International Journal of Plasticity, 177 (2024) 103991.
- 2. Y. Huang, S. Yao, H. Chen, P. Li, K. Wang*, et al, Journal of Nuclear Materials, 606 (2025) 155617.
- 3. Y. Wen, Y. Huang, K. Wang*, W. Zhu, X. Li, et al, Scripta Materialia, under review (2025)

激光加载下炸药晶体内孔洞缺陷演化及热点形成规律研究

<u>马骁</u>、傅华、郑贤旭、曹柱荣、马云灿、郭文灿、喻寅、王立锋、储根柏 中国工程物理研究院流体物理研究所、激光聚变研究中心、应用物理与计算数学研究所 Email: maxiao_nwpu@163.com

"热点"是影响炸药感度、点火反应和起爆机理的关键因素。目前普遍认为,空洞坍塌是热点形成 的重要原因,但尚未对其机理进行深入分析。在本研究中,使用了一种由激光驱动压缩、100ps时间分 辨X射线多帧成像和多点光子多普勒测速仪组成的新型实验系统,对炸药晶体中的空洞坍塌过程进行 了定性和定量研究。实验率先证实了HMX晶体中空隙坍塌的两种主要模式,即射流坍塌和整体坍塌。 空隙中的射流被证明是导致热点形成的关键因素。孔隙坍塌模式随加载强度而变化,两种坍塌模式转变 的压力范围被确定在12GPa至23GPa的范围内。此外,射流坍塌的平均坍塌速率快于整体坍塌,射流 坍塌和整体坍塌的早期坍塌速率均快于后期。研究结果为开发具有预测能力的爆炸冲击起爆模型奠定了 基础。

关键词: 热点、空洞坍塌、射流、炸药晶体、激光驱动压缩、X 射线成像

冲击加载下纳米晶高熵合金多层级变形机制与强度演化

李旺辉

新加坡科技研究局高性能计算研究院 Email: liwanghui9@gmail.com

摘要:

材料的宏观力学性能取决于微结构特征,晶粒尺寸是材料重要的典型微结构参数之一。晶粒细化强 化(通常称为 Hall-Petch (HP)强化)已被广泛用于强化多晶金属和合金,其主要机理是晶界(GB)对位 错运动的阻塞作用。然而,当晶粒尺寸降至几纳米或几十纳米时,晶界自身的变形、运动在介导塑性变 形中的作用变得更加显著,导致"尺寸越小越弱"的现象,通常称为反 Hall-Petch (IHP)现象。在过去的 二十年中,常压常温下的材料中的 HP 和 IHP 关系已被广泛研究。现有关于 HP 和 IHP 关系的理论研究 主要集中在准静态加载条件下,并且通常仅仅独立考虑压力或温度的影响。然而,多晶合金/金属中的 变形机制,包括基于位错的塑性活动和晶界介导的塑性活动以及相变,可能是速率依赖性的,并同时受 压力和温度的影响。材料在冲击加载下的行为与传统准静态加载相比要复杂得多。在冲击加载时,材料 在波前经历高应变率,同时伴随着压力和温度的升高。随后,冲击波前后的材料达到由流体动力学高压 和高温度特征的稳态。冲击波前后的材料响应不仅取决于内部微观结构(例如晶粒尺寸、晶体取向等), 还取决于外部加载条件(例如压力、温度和应变率等)。随着冲击强度的增加,一系列塑性变形事件甚 至相变可能被触发。迄今,冲击加载下材料强度从 HP 到 IHP 的转变关系尚未厘清。针对该问题,本工 作以纳米晶 CoCrFeMnNi 高熵合金(HEAs)为载体,结合大规模原子模拟和理论建模方法,研究了纳 米晶 CoCrFeMnNi HEAs 在宽冲击压力范围内的多层级变形机制,揭示了这些变形机制的不同晶粒尺寸 依赖特性并给出了物理解释,并提出了考虑多种硬化和软化机制且包含晶粒尺寸效应的本构模型,首次 将 HP 和 IHP 关系从准静态加载扩展到冲击加载条件,成功地预测了宽广冲击压力范围内的 HP-IHP 转 变。该工作可为在极端高应变率、高压条件下服役的先进纳米晶合金/金属的设计和优化提供重要参考

关键词:冲击加载;流动应力;Hall-Petch;Inverse Hall-Petch;多层级变形机制 参考文献

 Wanghui Li, Meizhen Xiang, Zachary Howard Aitken, Shuai Chen, Yilun Xu, Xinyu Yang, Qingxiang Pei, Jian Wang, Xiaoyan Li, Guglielmo Vastola, Huajian Gao, Yong-Wei Zhang. Unraveling the Hall-Petch to inverse Hall-Petch transition in nanocrystalline high entropy alloys under shock loading, International Journal of Plasticity 178 (2025)104010

含气疏松金属的冲击压缩响应

伍鲍,王欣欣*,王裴

北京应用物理与计算数学研究所 Email: xxwang14b@alum.imr.ac.cn

衰减冲击波在金属表面的反射(如炸药爆轰或强激光加载)使得金属内部形成复杂的多 孔疏松结构。由于声速适配等多因素影响,金属界面会经历多次冲击加卸载过程,导致多孔 介质的再压缩和破碎。在实际工况下,气体在多孔介质中的渗透作用会导致含气疏松金属结 构的形成,对疏松金属的压缩特性产生显著影响。尽管大量工作研究了疏松金属在强冲击下 的孔洞塌陷机制、冲击雨贡钮关系等,目前对含气疏松金属动态压缩特性的影响规律和微观 机制认识尚不清楚,尤其缺乏其冲击压缩关系的理论描述模型。本工作基于铜-氦体系研究 了含气疏松金属的再压缩过程。通过构建随机的多孔结构以模拟首次加载产生的微层裂损伤, 进一步研究不同氦浓度和疏松度下多孔铜中冲击波传播、热力学响应、塑性变形的基本规律 和微观机制。此外,建立了统一的理论描述框架给出含气疏松金属的冲击雨贡钮关系,并针 对铜-氦体系进行了对比验证,发现该模型能在宽压力范围内能很好地描述含氦疏松铜的冲 击绝热关系。

关键词: 微观模拟、疏松金属、雨贡钮关系、冲击压缩

动态强度超高的金刚石-TiC 复合材料研究

周亮1、贺端威1,2*、郑伟1

1. 四川大学原子与分子物理研究所

2. 四川大学高能量密度物理与技术教育部重点实验室

*E-mail: duanweihe@scu.edu.cn

摘要:

本研究通过高温高压反应烧结工艺,采用含 TiH₂的金刚石混合粉末和 Ti 包覆金刚石粉 末两种前驱体,成功制备出兼具高断裂韧性(达 11.6 MPa·m^{1/2})的新型金刚石-TiC 复合材 料(简称 DTC)。与此同时,该复合材料在动态强度方面展现出卓越特性。Hugoniot 弹性 极限(HEL)作为评估材料动态强度的重要标准被广泛采用,它代表了材料在冲击压缩破 坏前从弹性到塑性的过渡应力。在这里,本文报道了一种金刚石-TiC 复合材料(~ 11.5wt.% TiC),在 48~195 GPa 的冲击压力下,金刚石-TiC 自由表面的速度分布均呈现单 波结构。此外,对测量的 Us-Up(冲击波速度-粒子速度)关系进行线性拟合,表明在 195 GPa 的冲击压力下,没有弹塑性转变或固-固相转变。金刚石-TiC 复合材料的压缩比与 TiC 相似,但明显高于金刚石。这些非凡的动态响应本质上归因于独特的微观结构,其中金刚 石多晶被包裹在 TiC 基体中,提供了保护。本文的研究结果不仅开发了一种机械可靠、轻 质、高断裂韧性的装甲材料,而且合成成本低,为金刚石复合材料的冲击压缩性能提供了 新的见解。

关键词: 金刚石-TiC; Hugoniot 弹性极限; 装甲材料; 高温高压

参考文献:

1. Liang Zhou *et al.*, Diamond-TiC composite with an ultrahigh Hugoniot elastic limit. *Journal of Applied Physics* 133 (2023) 16.

2. K. Katagiri, *et al*, Shock response of full density nanopolycrystalline diamond. *Physical Review Letters* 125 (2020) 185701.

3. Zhou Liang *et al.* Heterogeneous diamond – TiC composites with high fracture toughness and electrical conductivity. *Journal of the European Ceramic Society* 44 (2024) 4887-4894.

冲击加载下金属铜中氦泡诱导温升与波前展宽机理研究

阎圣宁 1,2, 伍鲍 1, 王欣欣 1,*, 何安民 1, 王裴 1,3,*

北京应用物理与计算数学研究所,北京 100094;
2.中国工程物理研究院研究生院,北京 100088;

3.北京大学应用物理与技术研究中心,北京 100871

*Email: 王欣欣, xxwang14b@alum.imr.ac.cn; 王装, wangpei@iapcm.ac.cn

摘要: 含氦泡金属的层裂损伤过程主要由氦泡的膨胀和合并主导。在这一过程中损伤金属中的氦泡呈 现出不同的形状,如球形和椭球形等。这些形状差异能够影响二次冲击波的传播以及金属的热力学响应。 本研究通过分子动力学模拟,探讨了不同形状的氦泡在冲击载荷下的演化过程。研究对象包括三种不同 形状的氦泡: 长轴平行于冲击波传播方向的椭球形氦泡(HB-I)、短轴平行于冲击波传播方向的椭球形 氦泡(HB-II)、以及等轴的球形氦泡(HB-III)。结果表明,由于 HB-I 具有最大的界面曲率,它在铜基 体中引发的温升最为剧烈,热能积累也最为显著。当冲击波入射到氦泡时,会在金属-氦泡界面发生折 射,导致冲击波前沿展宽。与其他两种形状相比,HB-I 的波前展宽效应最为明显。此外,我们还比较 了具有不同形状的三种氦泡在不同冲击速度下引起的近表面破坏行为,发现 HB-I 最易诱发界面损伤, 并且具有最低的导致界面破坏的粒子速度阈值。

关键词:温升;波前展宽;氦泡;表面损伤;冲击加载

Direct visualization of laser-driven dynamic fragmentation in tin by *in situ* X-ray diffraction

Jing Yang,¹ Xinxin Wang,² Liang Xu,¹ Qiannan Wang,¹ Yi Sun,¹ Jiangtao Li,¹ Lin Zhang,¹ Yinghua Li,¹ Yuying Yu,¹ Pei Wang,² Qiang Wu^{1,*}, Jianbo Hu^{1,}

¹Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China ²Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China.

Abstract

In this work, we present a novel method for investigating laser-driven dynamic fragmentation in tin using in situ X-ray diffraction (DXRD). Experimental results demonstrate the feasibility of simultaneously identifying the phase and temperature of the fragments through analysis of the diffraction pattern. Surprisingly, we observe a deviation from the widely accepted isentropic release assumption, as the temperature of the fragments is found to be more than 100 K higher than expected due to the release of plastic work during dynamic fragmentation. Our findings are further verified through extensive large-scale molecular dynamics simulations, in which strain energies are transferred into thermal energies during the nucleation and growth of voids, leading to an increase in the temperature. Our findings thus provide crucial insights into the impact-driven dynamic fragmentation phenomenon and uncover the significant influence of plastic work on material response during shock release.

专题代号: K

强冲击下金属界面破碎演化的数值模拟与理论模型研究

<u>王欣欣</u>,伍鲍,鲍强,隋吴男,邵建立,孙海权,何安民,王裴 北京应用物理与计算数学研究所 Email: xxwang14b@alum.imr.ac.cn

摘要:炸药爆轰或强激光驱动下,当冲击波从金属自由面卸载时,会发生微喷射和微层裂等界面破碎现 象,形成不同形态和速度分布的破碎物质。该现象一直是聚变工程领域极为关注的重要物理问题。相关 问题的难点在于:1)金属微喷射与微层裂破坏与材料初始微介观结构、表面微纳尺度扰动、动力学状 态、材料物性等多因素敏感相关,是典型的跨尺度多物理现象;2)复杂服役条件引起的表面腐蚀和材 料内部纳米尺度氦泡对界面动态损伤破坏过程影响的物理机制和跨尺度建模;3)由于工程装置的结构 特点在金属材料中形成复杂多次冲击加卸载,因此不仅需要回答首次冲击波作用下的材料破坏行为,还 需要研究破碎金属多次冲击加卸载后的破坏演化,物理过程和机制更加复杂,是材料损伤破坏研究领域 的新科学问题。本报告将以典型低熔点金属为例,结合微观、宏观等不同尺度数值模拟方法,揭示复杂 动力学路径下金属界面破碎演化特征及多物理因素耦合影响机理,进一步通过理论分析建立相应的理论 模型。本研究一方面将服务于重大工程需求,同时也将助力界面破碎动力学理论体系的进一步发展完善。

关键词:强冲击,界面破碎动力学,微喷射,微层裂,理论研究

铈氢化物高温超导体的高压实验研究

<u>黄晓丽</u>

吉林大学物理学院,高压与超硬材料国家重点实验室 通讯联系人邮箱: huangxiaoli@jlu.edu.cn

自 1911 年发现汞的零电阻现象开始,高温和室温超导电性被列为 21 世纪初 30 个未解决的重大物理学 问题之一,是凝聚态物理领域的前沿研究热点。根据传统超导体 BCS 理论,科学家预言自然界中最轻 的元素氢在高压下极有可能转变成室温超导体,但到目前为止实验上仍然没有获得金属氢的直接证据。 基于"化学预压"的思想,富氢化合物被认为是实现金属氢和高温超导体的最佳途径,成为超导研究领 域的热点材料之一。新型硫氢化合物 H3S 和 LaH10 在高压下的超导转变温度均超过 200 K,相继创造 了当时的高温超导新纪录, 掀起了富氢化合物超导体的研究热潮。本报告主要介绍关于铈氢化物的系列 实验研究工作:通过引入外层具有 f 电子的铈金属,获得了两种类氢原子构型的铈氢化合物;原位电阻 实验测量发现率先在百万大气压以下获得超导温度超过百 K 的铈氢超导体,为温和条件下制备富氢化 合物超导体迈出了重要一步;同位素效应实验研究表明铈氢化物超导体属于电-声耦合机制的传统超导 体;基于 NV 色心测量技术,获得了铈氢超导体零电阻和抗磁性的双重超导特征,有力地验证了超导铈 氢化物的迈斯纳效应,破除了关于氢化物超导体的争议。 关键词:碳材料、高压、相变、同步辐射

参考文献

[1] Z. Zeng, H. Sheng, L. Yang, H. Lou, L. Tan, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, and Q. Zeng, Structural transition in cold-compressed glassy carbon, Physical Review Materials **3**, 033608 (2019).

[2] L. Tan, H. Sheng, H. Lou, B. Cheng, Y. Xuan, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, Q. Zeng, F. Peng, and Z. Zeng, High-Pressure Tetrahedral Amorphous Carbon Synthesized by Compressing Glassy Carbon at Room Temperature, The Journal of Physical Chemistry C **124**, 5489 (2020).

[3] Z. Zeng, H. Sheng, H. Lou, Y. Chen, T. Liang, X. Chen, F. Zhang, K. Glazyrin, H.-P. Liermann, and Q. Zeng, Mechanism of thermally assisted stabilization of pressure-induced \$s{p}^{3}\$ bonds in amorphous carbon, Physical Review B 109, 214113 (2024).

[4] Z. Zeng, L. Yang, Q. Zeng, H. Lou, H. Sheng, J. Wen, D. J. Miller, Y. Meng, W. Yang, W. L. Mao *et al.*, Synthesis of quenchable amorphous diamond, Nature Communications **8**, 322 (2017).

[5] Z. Zeng, J. Wen, H. Lou, X. Zhang, L. Yang, L. Tan, B. Cheng, X. Zuo, W. Yang, W. L. Mao *et al.*, Preservation of high-pressure volatiles in nanostructured diamond capsules, Nature **608**, 513 (2022).

高压下的新结构、新规律和新方法

<u> 董校</u>

南开大学物理科学学院 Email: xiao.dong@nankai.edu.cn

摘要:

高压下经常会出现常压难以实现的结构、物理现象和化学反应,吸引了大量科学工作者的关注。但高压物质蕴含的普遍规律性问题虽极为重要却仍有待解决。报告人长期从事高压物理研究,聚焦高压下特有的物质相变规律,在理论计算程序开发和高压实验技术发展两方面均做出突出贡献,致力于从基本理论出发,构建起高压物质科学的物理图像和理论框架,有能力将高压下的物质结构设计、物理规律探索和方法创新三方面结合统一,发展高压物质科学的研究范式。主要成果有:1)发现新物质:在高压下预测了若干新型化合物,如合成了以首个高压固体氦化物 Na2He 为代表的多种氢化物高压相[1],改变了惰性元素氢不能形成稳定化合物的传统认识;预测了矿物硅酸盐的新型高压水合物并基于该水合物提出了地球水起源的新假说[2]:2)揭示新规律:发现了高压下元素周期律和元素重要性质(电负性、电子基态等)的变化规律,建立了高压下元素性质演化的物理图像[3]:3)发展新方法:理论计算上,发展了可变原胞路径预测方法,参与提出了共格结构为基元的石墨-金刚石相变新机制[4];实验上,共同发展了毫秒级加压方法,不仅可以用于新物质探索和材料合成,也能在压机中实现等熵加压过程,进而开发出原位格林艾森参数测量技术[5]。

关键词: 高压; 质子化合物; 高压下的物质规律

参考文献

- [1] Xiao Dong, Artem R. Oganov* et al. Nat. Chem. 9, 440-445 (2017);
- [2] Han-Fei Li... Xiao Dong*, Hui-Tian Wang. Phys. Rev. Lett. 128, 035703 (2022);
- [3] Xiao Dong*, Artem R. Oganov* et al. Proc. Natl Aca. Sci 119, 2117416119 (2022);
- [4] Kun Luo+...Xiao Dong+...Zhisheng Zhao* et al. Nature 607 (7919), 486 (2022);
- [5] Jun Kong+... Xiao Dong*... Lei Su*, Guoqiang Yang*. Phys. Rev. Lett. 131, 266101 (2023);

专题代号:K

Redox impacting the deep Earth

<u>林彦蒿</u>

Center for High Pressure Science and Technology Advanced Research, Beijing 100193, China Email: yanhao.lin@hpstar.ac.cn

Abstract: Recent studies proved that stishovite and post-stishovites as high-pressure phases of SiO₂ have the potential to carry weight percent levels of water into the Earth's interior along the geotherm of the subducting oceanic crust¹⁻³. As slabs subducted to the deepmost mantle, dehydration of these dense hydrous silica phases can potentially change physicochemical properties of the Earth's mantle by reducing melting point, forming new high-pressure phases and enhancing the oxygen fugacity heterogeneity of lower mantle⁴. The mantle's oxygen fugacity is also thought to have increased over accretion and core formation due to increasingly oxidated impactors and lower mantle self-oxidation, but the influence of this on the solidus of deep primitive mantle materials has not been well constrained. We assess the effect of oxygen fugacity on conditions at the bottom of a magma ocean by experimentally determining the solidus of mantle pyrolite at pressures of 16–26 GPa at high oxygen fugacities, and we find that over this pressure range the solidus in experiments conducted under oxidising conditions is at least 230-450 °C lower than in experiments conducted under more reducing conditions⁵. The strong influence of oxygen fugacity on mantle melting suggest that models of early Earth thermal evolution and geochemical models of core formation should be reassessed.

Key words: Oxygen fugacity, Melting behavior, Deep Earth

References:

1. Lin Y. et al. Evidence for the stability of ultrahydrous stishovite in Earth's lower mantle. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 117, 184–189 (2020).

2. Tsutsumi Y. et al. Retention of water in subducted slabs under core-mantle boundary conditions. Nat. Geosci. doi.org/10.1038/s41561-024-01464-8 (2024).

3. Lin Y. *et al.* Hydrous SiO₂ in subducted oceanic crust and H₂O transport to the core-mantle boundary. *Earth Planet. Sci. Lett.* **594**, 117708 (2022).

4. Lin Y. and Mao H. K. Dense hydrous silica carrying water to the deep Earth and promotion of oxygen fugacity heterogeneity. *Matter Radiat. Extremes* **7**, 068101 (2022).

5. Lin Y. et al. Melting at the base of a terrestrial magma ocean controlled by oxygen fugacity. Nat. Geosci. 17, 803-808 (2024).

极端条件下的玻璃碳

曾徵丹

北京高压科学研究中心 Email: zengzd@hpstar.ac.cn

摘要:碳材料具有丰富的同素异形体。其中,玻璃碳因其易调控的性能而受到广泛关注。高压可以显著 改变碳材料的原子排列和键合方式,因此,玻璃碳材料的高压研究为新型碳材料的开发提供新的机遇。 我们利用多种高压原位同步辐射 X 射线技术,结合电镜、拉曼光谱以及分子动力学模拟,对玻璃碳在 高压下的行为进行了系统的研究。研究发现常压下 sp²键合的玻璃碳在高压下会发生结构相变,转变为 sp³键合的四面体非晶碳,然而这种高压四面体非晶碳无法保存到常压[1,2];而在高压的基础上引入高 温则会帮助诱发不可逆的结构转变,在 58GPa、~730 K 下玻璃碳会转变为一种 sp³键含量约 50%的高 强度非晶碳[3];进一步提高温度,我们发现在 40-50 GPa、~1800 K 下,玻璃碳转变为一种几乎完全 sp³ 键合的"非晶态金刚石",这种非晶碳金刚石具有极高的体模量[4]。另一方面,我们的研究还发现压力 可以提高玻璃碳对挥发性物质的渗透性,并利用高温高压下玻璃碳一金刚石的相变合成了内部包含高压 态物质的金刚石高压舱材料,从而实现了高压态材料在常压环境下的保存和原位电镜表征[5]。

关键词:碳材料、高压、相变、同步辐射

参考文献

[1] Z. Zeng, H. Sheng, L. Yang, H. Lou, L. Tan, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, and Q. Zeng, Structural transition in cold-compressed glassy carbon, Physical Review Materials **3**, 033608 (2019).

[2] L. Tan, H. Sheng, H. Lou, B. Cheng, Y. Xuan, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, Q. Zeng, F. Peng, and Z. Zeng, High-Pressure Tetrahedral Amorphous Carbon Synthesized by Compressing Glassy Carbon at Room Temperature, The Journal of Physical Chemistry C **124**, 5489 (2020).

[3] Z. Zeng, H. Sheng, H. Lou, Y. Chen, T. Liang, X. Chen, F. Zhang, K. Glazyrin, H.-P. Liermann, and Q. Zeng, Mechanism of thermally assisted stabilization of pressure-induced \$s{p}^{3}\$ bonds in amorphous carbon, Physical Review B 109, 214113 (2024).

[4] Z. Zeng, L. Yang, Q. Zeng, H. Lou, H. Sheng, J. Wen, D. J. Miller, Y. Meng, W. Yang, W. L. Mao *et al.*, Synthesis of quenchable amorphous diamond, Nature Communications **8**, 322 (2017).

[5] Z. Zeng, J. Wen, H. Lou, X. Zhang, L. Yang, L. Tan, B. Cheng, X. Zuo, W. Yang, W. L. Mao *et al.*, Preservation of high-pressure volatiles in nanostructured diamond capsules, Nature **608**, 513 (2022).

机器学习驱动的物质模拟方法发展及其应用

孙建

南京大学物理学院/固体微结构物理全国重点实验室 (jiansun@nju.edu.cn)

摘要

在本报告中,我将简要介绍本课题组自主开发和参与开发的几个机器学习驱动的物质模拟方法,包括机器学习与图论辅助的晶体结构搜索方法 MAGUS、高精度消息传递机器学习力场HotPP、机器学习分子动力学引擎 GPUMD 等。再次,我将以我们的最新研究进展为例,汇报这些方法在不同研究领域中的应用,包括行星内部物质的研究,新材料的预言和材料相变路径的动力学模拟等等。

MAGUS 软件注册地址: https://www.wjx.top/vm/m5eWS0X.aspx

参考文献:

- 1. Yu Han et al., "Efficient crystal structure prediction based on the symmetry principle", Nature Computational Science 5, 255 (2025). https://doi.org/10.1038/s43588-025-00775-z
- Junjie Wang et al., "MAGUS: machine learning and graph theory assisted universal structure searcher", Natl. Sci. Rev., nwad128 (2023). <u>https://gitlab.com/bigd4/magus</u>
- 3. Zheyong Fan et al., "GPUMD: A package for constructing accurate machine-learned potentials and performing highly efficient atomistic simulations", J. Chem. Phys. 157, 114801 (2022).
- 4. Junjie Wang et al., "E(n)-Equivariant Cartesian Tensor Message Passing Interatomic Potential", Nature Commun. 15, 7607 (2024). <u>https://gitlab.com/bigd4/hotpp</u>
- 5. Shuning Pan et al., "Magnesium oxide-water compounds at megabar pressure and implications on planetary interiors", **Nat. Commun.** 14, 1165 (2023).
- 6. Hao Gao et al., "Superionic Silica-Water and Silica-Hydrogen Compounds in the Deep Interiors of Uranus and Neptune", **Phys. Rev. Lett.** 128, 035702 (2022).

