

科学家在二氧化锗熔体中发现三配位的锗原子

2023-11-23 来源：合肥物质科学研究院

【字体：大 中 小】

 语音播报

中国科学院合肥物质科学研究院安徽光学精密机械研究所研究员万松明团队与上海大学高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室教授尤静林团队，在二氧化锗 (GeO_2) 熔体中发现了三配位的锗原子。近期，相关研究成果发表在《自然-通讯》(*Nature Communications*) 上。

固态物质存在的两种主要形式——晶体和玻璃体，均孕育于高温熔体。高温熔体的结构关系到熔体的宏观性质、晶体的生长机理和缺陷的形成规律、玻璃体的结构和性质，是物理、化学、材料、地学等学科关注的重要基础问题之一。然而，由于缺乏有效的分析手段，限制了科学家对熔体结构的认识。

2008年，安光所采用高温原位拉曼光谱技术，发现了晶体结构向熔体结构转变的一般规律，开辟了认识熔体结构的新途径；2013年，率先采用密度泛函理论 (DFT) 计算方法，实现了对熔体拉曼光谱的全谱精确拟合，构建了完整的熔体结构研究新方法。基于这一方法，研究先后发现了多种只存在于熔体中的特殊分子结构，解释了硼酸盐熔体的粘度反常现象，揭示了多种功能晶体的生长机理。

作为基础材料， GeO_2 熔体的结构备受关注。普遍的观点认为，在 GeO_2 熔体中锗原子周围存在至少四个配位氧原子。万松明团队采用高温拉曼光谱实验技术与DFT理论计算方法，通过研究 GeO_2 熔体拉曼光谱中位于340和520 cm^{-1} 两个特殊振动峰的结构起源 (图1)，在 GeO_2 熔体中发现了三配位的锗原子，颠覆了对锗氧结构的传统认知。这一成果有望平息关于 GeO_2 熔体结构的争论。 GeO_2 熔体的电子结构分析结果 (图2) 进一步揭示了 GeO_2 熔体不仅存在稳定的Ge-O键也存在不稳定的Ge-O键 (Fluxional Bond)，并从分子层次诠释了 GeO_2 熔体兼具流动性与粘滞性的根本原因。三配位锗原子的发现，为认识锗酸盐熔体结构提供了新视角，将有助于更好地探讨锗酸盐晶体和玻璃的形成过程、缺陷结构和性质。此外， GeO_2 作为二氧化硅 (SiO_2) 的同类物质，其熔体结构的研究成果有望为地质和矿物学研究提供新思路。

研究工作得到国家自然科学基金、合肥研究院院长基金和先进激光技术安徽省实验室主任基金等的支持。

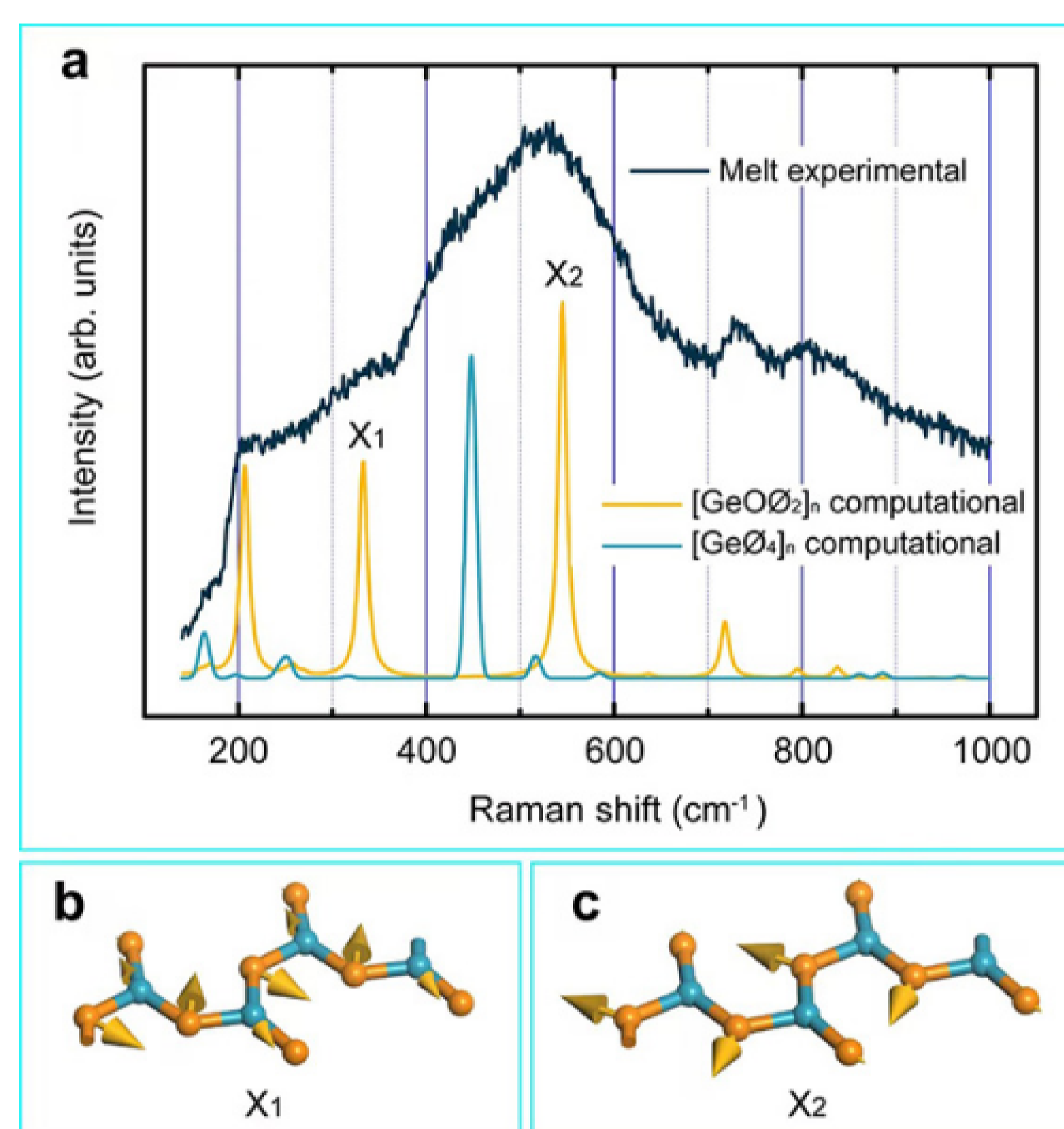
[论文链接](#)


图1. GeO_2 熔体的拉曼光谱和两个特殊振动峰的振动模式。(a) GeO_2 熔体 (由 $[\text{GeO}_2]_n$ 链和 $[\text{GeO}_4]_n$ 网络构成) 的实验和计算拉曼光谱；(b) 340 cm^{-1} 拉曼峰的振动模式；(c) 520 cm^{-1} 拉曼峰的振动模式。蓝色和橙色小球分别代表锗原子和氧原子。

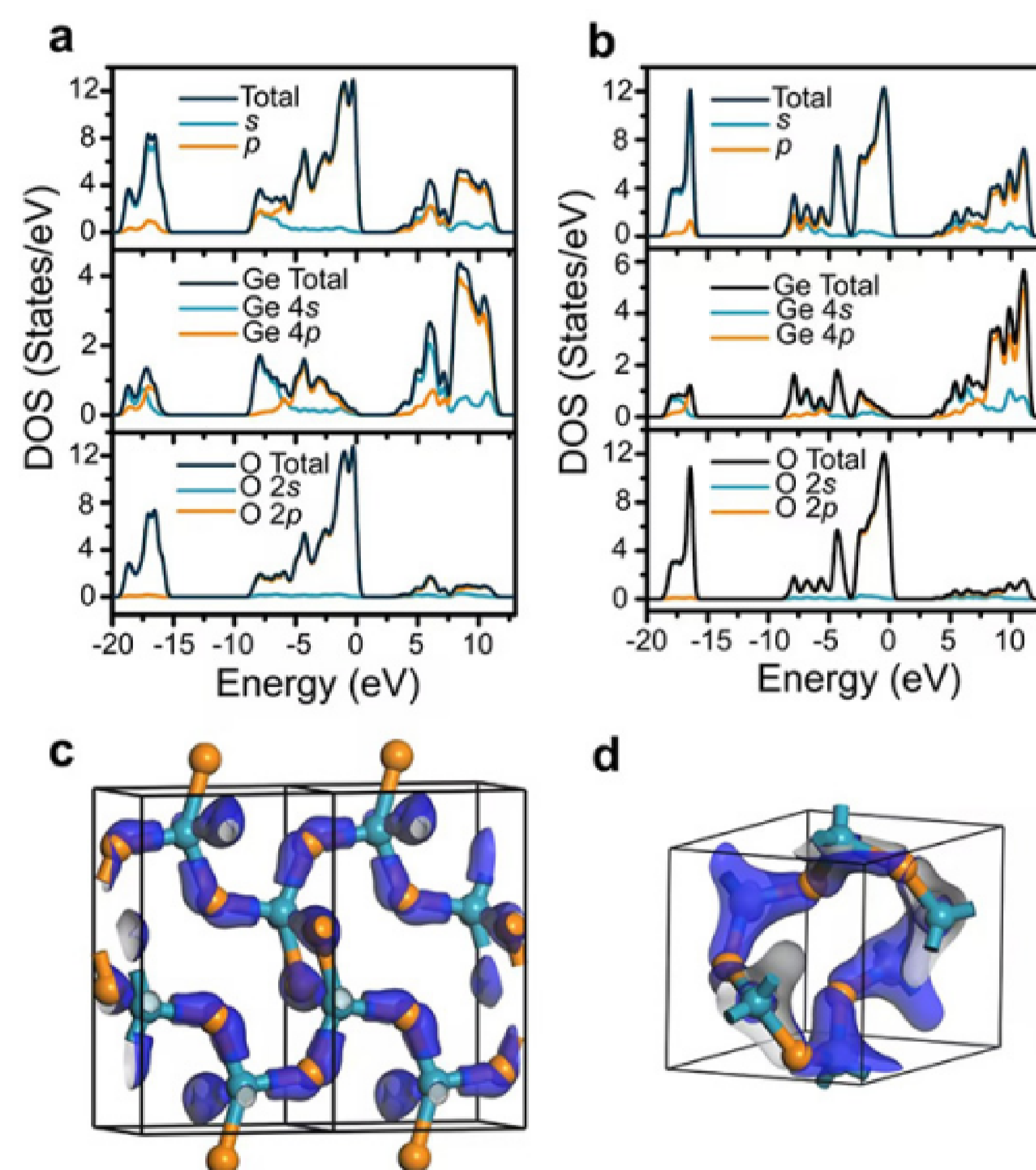


图2. GeO_2 熔体中两种聚合物 ($[\text{GeO}_2]_n$ 链和 $[\text{GeO}_4]_n$ 网络) 的电子结构。(a) $[\text{GeO}_2]_n$ 链的总态密度和分态密度；(b) $[\text{GeO}_4]_n$ 的总态密度和分态密度；(c) $[\text{GeO}_2]_n$ 在-8.0到-7.1 eV能量区间的成键轨道；(d) $[\text{GeO}_4]_n$ 在-8.6到-7.5 eV能量区间的成键轨道。

 责任编辑：侯茜 打印     更多分享

> 上一篇：研究揭示天然产物vinigrol靶向蛋白质二硫键异构酶的抗炎机制
> 下一篇：研究揭示多倍体小麦亚基因组特异转座子介导发育可塑性



扫一扫在手机打开当前页