



[高级]

[首页](#) [新闻](#) [机构](#) [科研](#) [院士](#) [人才](#) [教育](#) [合作交流](#) [科学传播](#) [出版](#) [信息公开](#) [专题](#) [访谈](#) [视频](#) [会议](#) [党建](#) [文化](#)
 您现在的位置: [首页](#) > [科研](#) > [科研进展](#)

## 物理所等在硅、锗结构多样性与冷压相变研究中获进展

文章来源: 物理研究所

发布时间: 2013-04-24

【字号: 小 中 大】

IV族元素碳、硅、锗具有丰富的结构多样性。由于其特有的共价键结构,它们具有许多类似的特性,同时因其共价键强弱的不同,它们在压力作用下会引起一些不同的结构相变。常温常压下单质碳通常以石墨形式存在,由于其特有的层状结构,在室温冷压(大于15 GPa)条件下,石墨通过层间的滑动、扭曲、重构形成高压类金刚石碳结构,但是当压力解除时呈现可逆反应并恢复到石墨碳的层状结构【*PRL* 106, 075501 (2011)】。另一方面,更为有趣的是硅锗,常温常压下以金刚石结构(Si-I或Ge-I)存在,在冷压条件下形成体心四方超密白锡( $\beta$ -tin, Si-II或Ge-II)结构。在慢速降压过程中,这种结构相变呈现不可逆性:硅形成新的体心立方BC8结构,而锗形成简单四方ST12结构。尽管这一现象早在50年前【*Science* 139, 762 (1963)】已被实验发现,但是其高压相变机制依然不明。

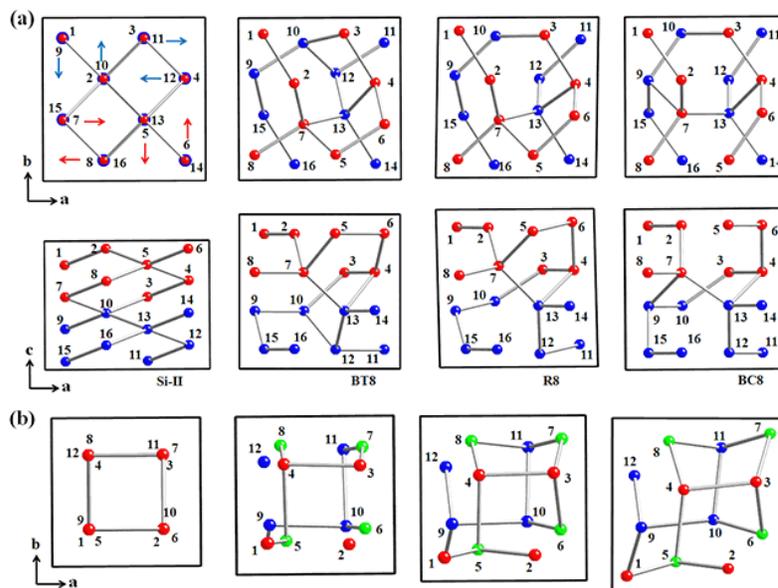
最近,中科院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室(筹)王建涛研究员及其合作者美国内华达大学陈长风教授和日本东北大学金属材料研究所川添教授通过第一性原理计算,从反应势垒和能量(热焓)两方面系统地阐明了其内在的高压相变机制。

研究表明,在这些复杂的相变过程中,反应势垒起着至关重要的作用。发现在降压过程中,硅(Si-II相)通过双重超晶格内的Si-Si键的旋转重构(double cell local bond-rotation reconstruction)首先形成一个新的体心四方BT8结构(参考图1a),然后随着压力的降低形成一个体心菱形R8结构,最终当压力小于2.5 GPa时形成体心立方BC8结构。这种相变路径和直接回到金刚石结构(Si-I)相比具有较小的反应势垒和晶格形变,因此在降压过程中形成BC8硅结构而难以直接恢复到金刚石结构。这一相变机制在锗的快速降压过程中同样得到证实。但是在慢速降压过程中,由于能量的关系,锗(Ge-II相)更倾向于通过一个三重超晶格内的Ge-Ge键的扭曲重构(trinary cell local bond-twisting reconstruction)机制形成简单四方ST12结构(参考图1b)。这些结果全面地解释了IV族元素的室温高压相变及其高压相的形成机制,对有关材料制备与物性研究具有重要的科学意义。

相关研究结果发表在4月15日出版的美国《物理评论快报》【*Phys. Rev. Lett.* 110, 165503 (2013)】。

该工作得到了国家自然科学基金面上项目的支持。

[相关链接](#)



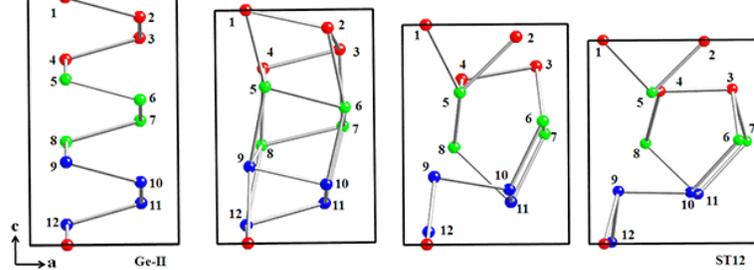


图1. (a) 从Si-II高压相到BT8, R8, BC8的结构相变过程; (b) 从Ge-II高压相到锗ST12的结构相变过程。

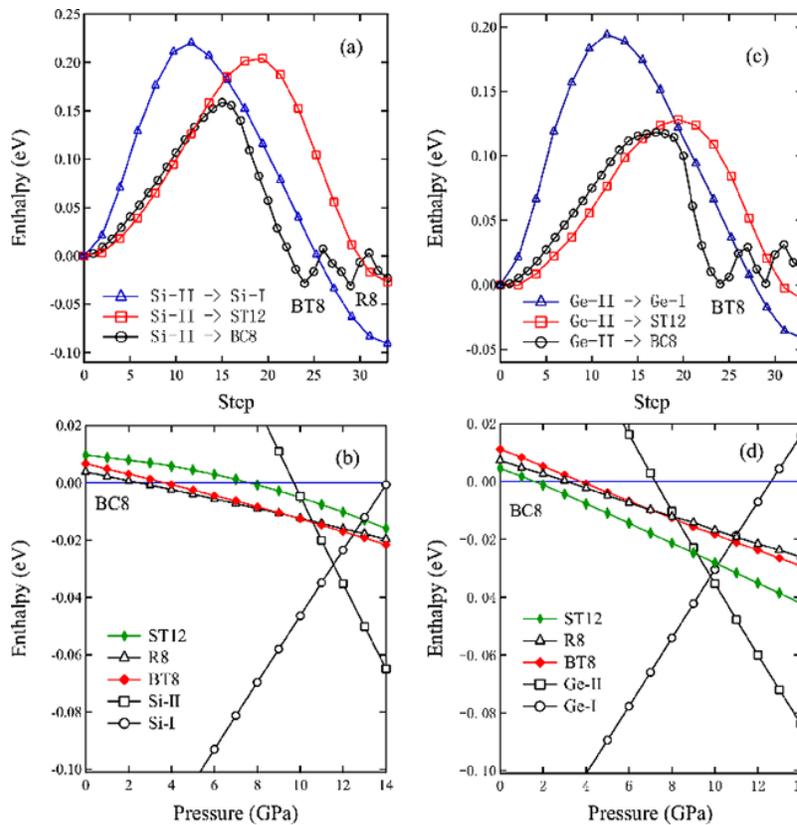


图2. (a) 8GPa下从Si-II相到BT8, R8和BC8相变过程的热焓变化以及从Si-II相到ST12和Si-I的热焓变化; (b) 各种Si结构的热焓随压力的变化; (c) 8GPa下从Ge-II相到BT8, R8和BC8相变过程的热焓变化以及从Ge-II相到ST12和Ge-I的热焓变化; (d) 各种Ge结构的热焓随压力的变化。

打印本页

关闭本页