

网站首页 研究所概况 研究队伍 研究生教育 院地合作 国际交流 科研成果

科学传播 学会 信息公开 继续教育 党群园地

当前所在位置: 首页 >> 新闻动态 >> 科研动态

地化所高压室发现压力导致辉锑矿的结构相变机制

发布时间: 2018-03-06

自2014年入选中国科学院百人计划以来,代立东研究员在中科院百人计划项目、中科院前沿科学重点项目、中科院先导专项等资助下,依托于我所地球内部物质高温高压重点实验室,自主筹划并依次成功搭建了具有国际领先水平的金刚石对顶砧物性测量、高温高压红外光谱学实验测量、高压理论计算等综合性物性测量实验平台、测试系统和理论计算平台。针对地球内部的主要金属硫化物矿物,已一系列系统研究,并取得了大量的原创性的研究成果和重要的研究进展。

基于这些综合测量实验平台和实验系统,该团队主要成员代立东、柳凯祥等将金刚石对顶砧高压设备与电化学交流阻抗谱、拉曼光谱、透射图谱、原子力图谱、第一性原理计算等多种手段有机结合,对高压下辉锑矿电学性质和谱学性质进行了原位系统而深入地研究,并取得突破性的重要进展。众所周知,常压下的辉锑矿属于斜方晶系,化学组成分子式: Sb_2S_3 , 具有Pnma空间群和常温常压条件下的带隙能大小为~1.7 eV。研究发现: (a) 在5.0 GPa和15.0 GPa条件下,辉锑矿分别发生等结构相变 (IPT) 和压致相变 (PPT); (b) 在34.0 GPa和40.1 GPa条件下,辉锑矿分别发生金属化和不定形态的矿物相转变; (c) 针对静水压和非静水压的恢复样品对比测试结果表明,非静水压条件下辉锑矿金属化表现出不可逆性,而静水压条件下样品金属化具有可逆性; (d) 实验过程中金刚石压腔样品腔体自身存在的差应力和层间相互作用是导致不同静水压条件下的可逆性质差异的重要原因; (e) 基于Materials Studio的CASTEP模块,运用第一性原理理论计算,发现在极端超高压条件下,辉锑矿所表现出的能带结构、总密度和投影密度等独特物理学参数发生明显变化,对实验结果进行了很好的验证。

该成果发表在2018年最新一期的Physical Review B刊物上,这是代立东课题组在过去一年内,产出的第3篇Nature Index检索文章,全文可见:

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 Sb_2S_3 . Physical Review B, 2018, 97, 024103, doi: 10.1103/PhysRevB.97.024103.

全文链接: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.97.024103>.

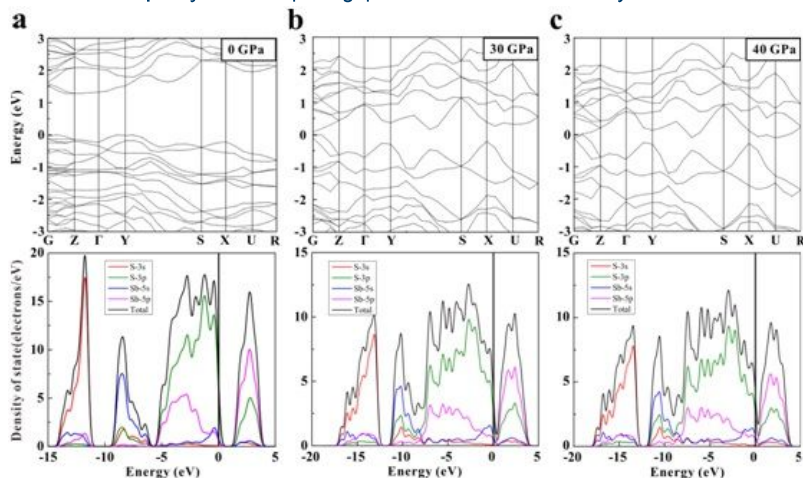


图1 在0、30.0和40.0 GPa压力条件下第一性原理理论计算的辉锑矿能带结构、总密度和投影密度 [Dai et al., Phys. Rev. B, 2018, 97, 024103, doi: 10.1103/PhysRevB.97.024103].

(高压室代立东组供稿)

·8月6号中国科技大学倪怀玮教授报告预告
·第十三届全国固体核径迹学术会议第...
·关于职工人事档案专项审核认定以及...
·关于召开“第六届全国沉积物环境与...
·第七届全国环境地球化学大会通知 (2...
·7月18日美国伊利诺伊大学香槟分校 (...
·中国科学院地球化学研究所关于举办...
·中国科学院地球化学研究所单一来源...
·7月2日美国纽约州立大学矿物物理研...
·中国科学院地球化学研究所“电感耦...
·“2018年纳米地球科学国际学术研讨...
·2018年中国土壤学会土壤化学专业委...

请输入关键字

搜索

·爱尔兰国立大学张朝生博士访问地化所
·中国矿物岩石地球化学学会召开2018...
·矿床室第13期“青年学术论坛暨青年...
·地化所召开2018年度“西部之光”人...
·地化所开展保密培训专题报告
·美国伊利诺伊大学香槟分校宋晓东教...
·科技部21世纪议程管理中心主任黄晶...
·鑫控集团投资黑山羊产业助推水城县...
·亚热带生态所和地化所青促会小组举...
·地化所陈敬安、肖唐付、吴沿友研究...
·2018年纳米地球科学国际学术研讨会举行
·美国纽约州立大学矿物物理研究所李...
·中国地质大学汪在聪教授访问地化所



Copyright 2001-2018 中科院地球化学研究所 版权所有 黔ICP备13001045号 | 办公室电话:0851-85895422 电子邮件:bgs@vip.gyig.ac.cn