● **科研进展**

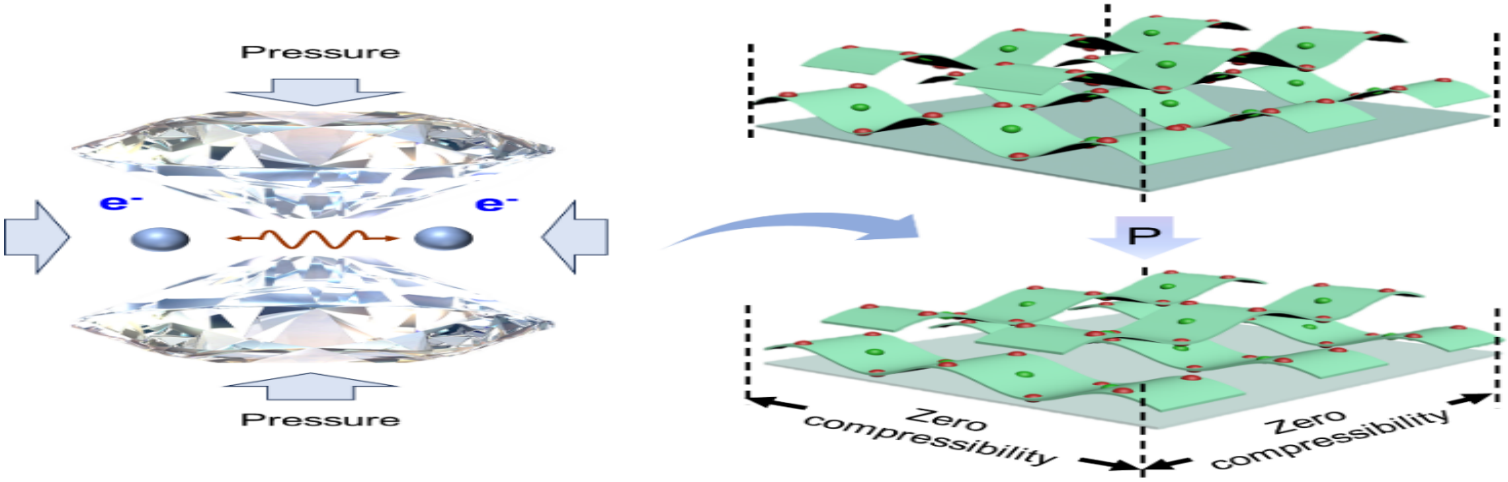
理化所在零面压缩材料的结构设计和新材料探索方面取得新进展

稿件来源：新型功能晶体研究组 发布时间：2024-01-26

零压缩是一种罕见的力学现象，它能够在静水压力环境下展现出一个或多个轴向尺寸的稳定性。与一维零压缩材料相比，二维零压缩（即零面压缩）材料不仅拥有更高维度的机械稳定性，同时能够在依赖于通量面积的信号传输中具有出色的应用。

零面压缩材料的微观结构模型非常复杂，通过压力下晶格中结构基元的耦合扭转直接投影到一个平面上，两个方向的零压缩性通常相互纠缠在一起，调控异常困难。中国科学院理化技术所新型功能晶体研究组受复合材料中正交编织模型的双向交叉波纹（bidirectional cross corrugate, BDCC）结构能实现高力学强度的启发，提出了通过构建原子尺度的BDCC结构来实现零面压缩性。先构筑波纹结构实现一维方向上的零压缩性，再将这些带状波纹结构进行双向交叉（即正交编织）排列，通过两个方向上力学性质的单独调控最终实现零面压缩性。利用这种结构调控设计策略，在晶体数据库中进行了大规模的结构搜索，利用高压同步辐射实验发现了具有独特BDCC结构的零面压缩铜基化合物Cu_2GeO_4。Cu_2GeO_4的零面压缩性低至1.58(26) TPa^{-1}，具有优异的抗压能力，在已发现的零面压缩材料中压力范围最宽（0 GPa~21.22 GPa）。高压拉曼测试结合第一性原理计算，揭示Cu_2GeO_4的零面压缩性来自于压力下$[CuO_2]_\infty$条带中$[CuO_4]$基团正常的收缩效应与$[CuO_4]$-$[CuO_4]$二面角打开的反常膨胀效应之间的巧妙平衡。在Cu^{2+}离子中，压力下电子从d_{x2-y2}成键轨道向非键d_{z2}轨道转移，增强了相邻$[CuO_4]$基团之间的排斥力，是$[CuO_4]$-$[CuO_4]$二面角打开这一反常膨胀效应的驱动力。

本研究工作提出的利用BDCC结构先一维方向单独调控再多维复合的结构设计策略为反常力学响应材料的结构设计和新材料探索提供了一种全新且简便的途径。所发现的Cu_2GeO_4是一种罕见的零面压缩材料，将为深海、深地等极端/复杂环境下精密信息传输、信号探测稳定性和灵敏性提升提供一类基础功能材料。相关研究成果以Realizing Persistent Zero Area Compressibility over a Wide Pressure Range in Cu_2GeO_4 by Microscopic Orthogonal-Braiding Strategy为题发表于*Angewandte Chemie International Edition*上。论文的第一作者为理化所博士研究生张兴宇，通讯作者为林哲帅研究员和姜兴兴研究员。研究工作得到国家自然科学基金的大力支持。



零面压缩材料Cu_2GeO_4中微观正交编织策略示意图

原文链接： https://doi.org/10.1002/anie.202318401 (https://doi.org/10.1002/anie.202318401)

(http://www.cas.cn/)

版权所有：中国科学院理化技术研究所 Copyright 2002-2024
地址：中国.北京 京ICP备05002791号