

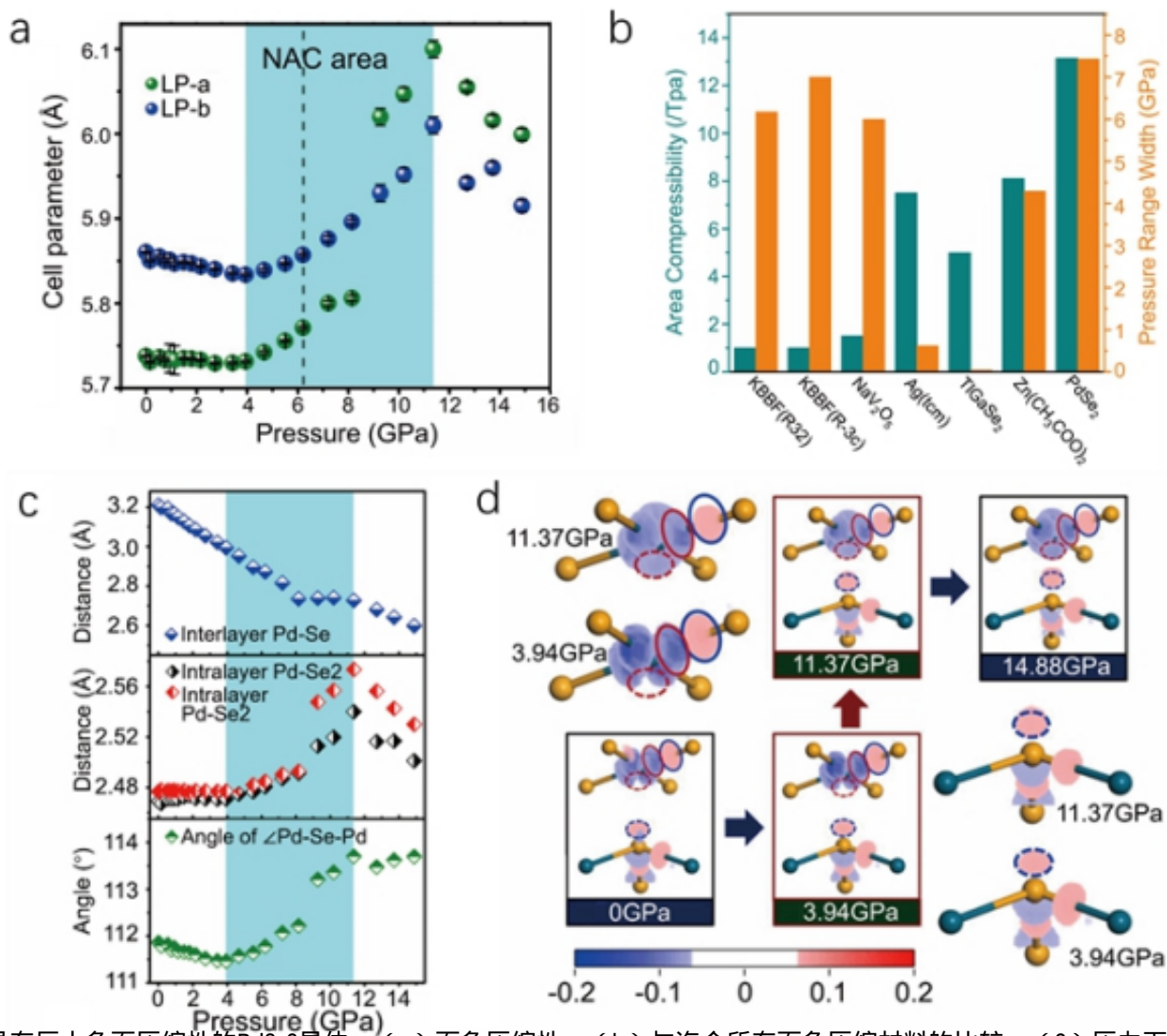
理化所关于强负面压缩性材料的研究取得进展

在等静压力下沿着特定方向尺寸发生膨胀的现象称为负压缩。负压缩这一反常的应力——应变响应特性是压力调控结构获得新奇物性（如超导、压致荧光等）以及突破常规材料性能极限（如泊松比、压电系数）的重要手段。从维度上分类，负压缩可分为线（一维）、面（二维）和体（三维）。面负压缩是负压缩性的极限，具有最高的结构—性能调控维度。幅度和压力区间决定了压力调控的精度和压力范围，是面负压缩性的两大关键指标。在Lifshitz机制主导的面负压缩材料中，负压缩性源自刚性结构基元构成的二维褶皱结构中褶皱的展开，具有很宽的压力范围，在这一材料体系中不断地提升面负压缩幅度是研究焦点。

近日，中国科学院理化所研究员林哲帅、姜兴兴等，提出在二维范德华层状晶体中通过压力诱导电荷转移达到增强晶格结构变化，进而提升面负压缩幅度的策略，发现了迄今面负压缩效应最强的材料PdSe₂晶体。该研究建立了压力下电子-晶格结构演变之间的关联，提出了全新的从电子结构角度调控设计面负压缩材料的新方法。

研究表明，在二维范德华晶体中，由于相邻层之间只存在范德华相互作用，压力下层间隙的剧烈收缩会使得层间发生强烈的相互作用。当二维层以贵金属Pd²⁺、Au¹⁺、Ag¹⁺、Cu²⁺等为中心离子的线状或平面状多面体为基本结构单元构成时，层间的阴阳离子之间会发生电荷转移，使得层内键长键角发生剧烈变化，从而大幅度地增强面负压缩性。在此“电荷转移”策略的基础上，该团队在二维范德华晶体数据库中进行了大规模的结构探索，结合同步辐射高压衍射实验，发现了具有高压迄今为止负面压缩幅度最大（-13.14 GPa）、压力范围最宽（3.94 GPa~11.37 GPa）的PdSe₂晶体。高压拉曼测试结合第一性原理计算表明，在PdSe₂晶体中，除了常规Lifshitz理论框架中的压力诱导褶皱展开外，压力下层内Pd-Se键反常的伸长对增强负面压缩具有关键作用，而层内-层间电荷转移导致的层内Pd-Se键键电荷的减少是压力下化学键伸长这一反常结构变化的内在驱动力。

相关研究成果以Unexpected Giant Negative Area Compressibility in Palladium Diselenide为题，发表在《国家科学评论》（National Science Review）上。北京大学科研人员在高压拉曼测试方面提供了帮助。



具有巨大负面压缩性的PdSe₂晶体：(a) 面负压缩性；(b) 与迄今所有面负压缩材料的比较；(c) 压力下结构的变化；(d) 压力下的电荷转移。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/200194.html>