

来源: [科学网 www.sciencenet.cn](http://www.sciencenet.cn) 发布时间: 2009-3-12 11:19:45

[小字号](#)[中字号](#)[大字号](#)

## 《自然》：中外科学家合作新发现挑战经典高压理论

金属钠在高压下转变为宽带隙绝缘体

据吉林大学消息：吉林大学超硬材料国家重点实验室马琰铭教授与德国马普所Eremets教授和瑞士苏黎世高工Oganov教授等科学家合作，在高压下碱金属钠的结构相变研究上取得突破性进展，发现金属钠在200万大气压转变为“透明”的宽带隙绝缘体。这一成果发表在3月12日最新一期的《自然》(Nature)杂志上(DOI: 10.1038/nature07786)。

学术界一直认为：高压可以有效缩短材料的原子间距，导致材料的价带和导带展宽，进而使绝缘体(或半导体)的价带和导带发生重叠，发生绝缘体—金属相变，或使金属的价带和导带重叠程度进一步增大。马琰铭教授及其合作者发现，金属钠在高压下竟然转变为宽带隙绝缘体，这一发现对经典高压理论提出了挑战，为高压理论的进一步发展带来了契机。

马琰铭教授首先从理论上预言：碱金属钠在超高压下将转变为宽带隙的绝缘体，绝缘体钠具有简单而独特的晶体结构——c轴高度压缩的双六角密堆结构。这是第一次在元素单质中发现这种结构。通常，碱金属在高压下会发生电荷转移。锂的s电子转移到了p轨道，钾，铷和铯的s电子转移到了d轨道，而钠的电荷转移非常特殊，其s电子却转移到了p和d轨道，p和d电子的杂化形成了钠的双六角密堆晶体结构。令人惊奇的是：绝缘体钠的芯电子云之间发生了高度交叠，钠原子的所有价电子受芯电子排斥而高度局域在晶格间隙之中，这些在间隙中“冻结”的价电子完全失去了自由电子的特性，使金属钠变成了绝缘体钠。绝缘体钠的电子特性与最近发现的新型电子化合物Electride非常相似，阳离子钠处于晶格的格点上，晶格间隙中高度局域的价电子扮演着阴离子的角色。此时芯电子对原子间化学成键产生了重要影响，从而导致了反常的压致金属—绝缘体相变。

合作者德国Eremets教授课题组利用高压原位光学测量、高压同步辐射X射线衍射和高压拉曼实验证实了马琰铭教授理论预言的金属—绝缘体相变。

该工作由吉林大学、德国马普所、瑞士苏黎世高工、美国芝加哥大学等单位合作完成，吉林大学超硬材料国家重点实验室是第一作者和通讯作者单位。该研究工作得到了科技部973计划的资助。

[更多阅读](#)

[《自然》发表论文摘要\(英文\)](#)

发E-mail给:



[打印](#) | [评论](#) | [论坛](#) | [博客](#)

读后感言:

发表评论

相关新闻

《科学》：我国学者金属材料研究获新发现  
桑树勋小组发现生活垃圾中重金属浸出规律

一周新闻排行

美科学家利用新工具发现数百篇疑似抄袭论文  
郑强任浙江大学党委副书记

首届中科院金属所“葛庭燧奖研金”评选结果揭晓  
内蒙古研发成功一种从粉煤灰中提取氧化铝的新技术  
巴西开发出可吸附重金属离子的转基因细菌  
“黄耀曾金属有机化学奖”颁奖 陆熙炎获终身成就奖  
新金属材料国家重点实验室08年度开放研究基金开...  
科学家称太空味道似烤牛排与焊接金属混合气味

中国工程院：浙大论文剽窃事件情况属实  
《肥胖评论》：女人为何比男人更容易发胖  
PRL：科学家成功模拟出克尔黑洞图像  
5位女性获颁2009年度世界杰出女科学家奖  
签证问题耗精力 外国人才难留美  
浙江大学称不再续聘卷入剽窃事件院士