
合肥研究院揭示振动熵对具有结构畸变的Half-Heusler体系稳定性的影响

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10002.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员张永胜课题组在振动熵对具有结构畸变的Half-Heusler (HH)体系稳定性影响研究方面取得新进展，相关研究不但为后续的实验提供了理论

指导，而且也理解相稳定性背后的物理机制提供了新思路。相关研究结果发表在Chemistry of Materials上。

HH材料由于具有优良的电学性质、力学性能、热稳定性和矿藏丰富等优势，使其在功能性（热电，拓扑和光电）材料领域备受关注。由于大量的HH材料第一性原理计算已经预测出立方相是其最稳定的结构，因此大部分HH高通量工作搜索高效新型功能材料的工作中都会使用立方相结构。然而后续的实验观测结果表明，部分HH材料的结构是低对称性结构，比如六角体系的LiZnSb和正交体系的TiNiGe, HfNiGe, HfCoAs, NbFeAs, NbCoGe, VCoGe等。第一性原理预测和实验结果不符，且原因至今尚未清楚，这严重影响了理论筛选和预测功能材料的准确性。

通常第一性原理计算是在0K下进行的，忽略了有限温度下熵对自由能的贡献。而实验合成通常在高温下(> 1000K)进行的，因此振动熵对HH材料相稳定的影响不可忽略。

为此，张永胜课题组针对理论与实验结果不符的17种HH体系，考虑有限温度的影响，采用第一性原理声子计算方法，研究了它们立方相和低对称性相在不同温度下的稳定性。基于振动熵的计算结果，研究发现所有体系的振动熵都倾向于稳定低对称性的结构。也就是说，在有限温度下低对称性结构更稳定，这与实验观察结果一致。低对称性结构具有高振动熵的原因是其中原子间成键较弱，原子振动较弱，因此会拉低声学支，导致低频区声子态密度较大，因此其振动熵比立方相的要

大。进一步考

虑到HH体系中固溶结构对功

能材料的重要影响，课题组也研究了 $\text{Ti}_{0.5}\text{Hf}_{0.5}$

NiGe固溶体系，发现振动熵仍然可以稳定低对称性结构。此外，合金体系中掺杂导致的成键无序性也对振动熵的影响很大。此项工作不但解释了计算和实验结果不符的物理原因，而且为后续实验上制备HH立方相提供了理论依据。

以上研究得到国家自然科学基金项目的资助。

[文章链接](#)

图1. 16种HH体系的正交相和立方相自由能之值。黑色(0 K)和红色(1000 K)代表不同温度下两相的自由能之差。对于所有的体系，两相自由能之差随温度升高而减小。

图2.16个HH体系
的正交相和立方相(a)振动熵之差
和(b)平均原子位移参数差值沿x
轴方向随温度的变化。紫线和紫色区域分别代表平均值和标准差。

研究团队单位：合肥物质科学研究院

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发