

研究人员提出“广义压强”概念

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/18471.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！

研究人员提出“广义压强”概念。2022年5月5日，四川大学原子与分子物理研究所雷力团队在国际物理学权威期刊《物理评论B》（Physical Review B）发表论文。

研究团队受到爱因斯坦广义相对论等效性原理的启发，提出了广义压强（Generalized pressure）概念。

论文的第一作者和第二作者分别为雷力研究员的20级硕士研究生陶雨和14级硕士研究生张雷雷，雷力研究员为通讯作者。四川大学原子与分子物理研究所为唯一论文作者单位。

在物理学中，压强是描述物体在单位面积上所受压力的大小的热力学参量。压强对物体的作用通常表现为体积收缩、密度增加。在高压条件下（1万个大气压以上），原子所占的空间被显著压缩，相邻电子间的相互作用增强，物质呈现出复杂的性质与状态。根据应力-应变（Stress-Strain）关系得到的状态方程（Equation of state, EOS）反映物质在高压下的压缩特性。一般情况下，状态方程仅考虑外部物理加载对物质的影响，在实验上通常由高压衍射实验测量得出。

2004年，凝聚态物理理论学家N. W. Ashcroft针对氢金属化问题提出化学预压缩（Chemical precompression）概念。他指出氢元素可通过与IVa族元素形成氢化物，产生一定程度的化学预压，从而降低氢金属化所需压强。随后的高压实验证明了Ashcroft思路的正确性，人们陆续发现多种高温超导氢化物，例如H₃S（100 GPa）、LaH₁₀（150 GPa）、CaH₆（172 GPa）。这些氢化物的金属化压强远远低于固态金属氢所需的压强（>500 GPa）。

化学预压缩概念来源于化学压强（Chemical pressure）思想。上个世纪90年代，人们在研究合金超导临界温度的时候就发现，化学掺杂或者离子取代引起的晶格收缩（或膨胀）能够产生类似于物理压强（Physical pressure）的效果。虽然，化学压强在氢化物金属化与超导研究的实验设计和机理分析中是不可或缺的因素。但是，关于化学压强在何种程度上等同于物理压强？化学压强与物理压强之间存在怎样的关联？如何标定化学压强的大小？这些问题一直以来均没有给出合理的解答。

针对以上问题，雷力团队提出的广义压强（Generalized pressure）概念认为，所有引起相同体应变的热力学因素都认为是等价的，广义压强是所有能够引起体应变热力学因素的系综。也就是说，只要引起的体应变的程度相同，化学压强和物理压强就是等价的。在高压下的物质具有内禀的广义压强相变点，在受到一定的化学压强的作用后，只要再施加较小的物理压强就能触发其相变的发生。这就是为什么化学预压后氢化物的金属化压强比纯氢体系还要低的缘故。

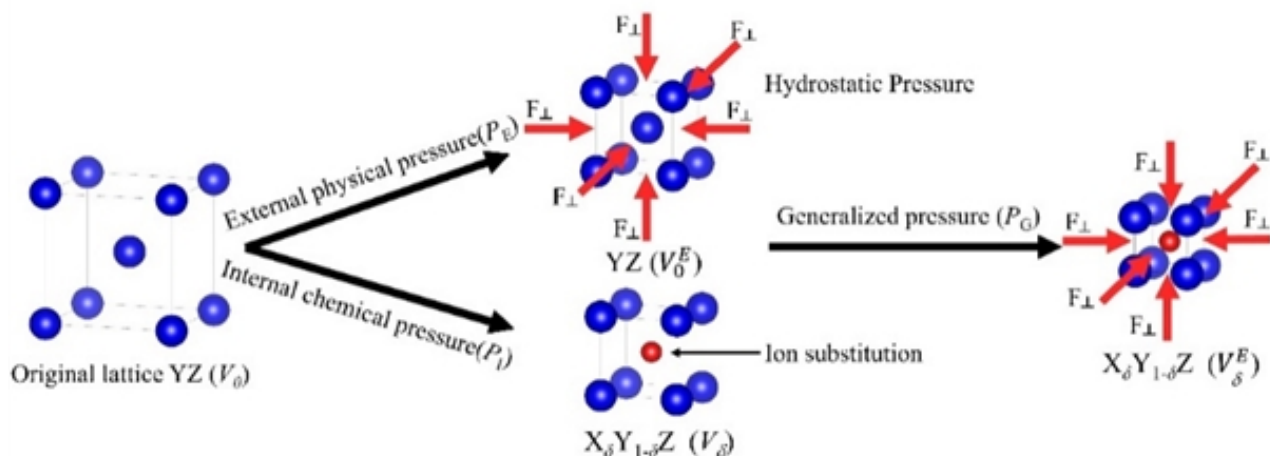


图1. 物理压强、化学压强与广义压强之间的关系

另外，考虑到压强属于强度量，各种压强之间不能进行简单的代数加减运算。研究人员以广延量体积建立等量关系，在给定的边界条件下，推导出了在多热力学因素作用下广义压强的状态方程（EGP）：

$$\frac{\prod_{n=1}^{\infty} (1 + \alpha_{n-1} P_n)^{\alpha_{n-1}} - 1}{\alpha_0}$$

为了验证EGP的正确性，他们基于理想合金模型，以三元半导体合金 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 为研究对象，通过预测合金和本征材料的高压结构相变点来验证EGP的正确性。研究人员还指出，基于体应变的等效性获得的状态方程仅是描述广义压强的一种形式。如果把其它受广义压强因素作用的可观测物理量作为等效参量（如电子态密度、键长、声子频率等），理论上可以导出相应的EGP。通过EGP可以预测除结构相变以外的其它高压相变。该研究成果对于深入认识物理压强和化学压强之间的关联具有重要意义，开拓了高压物理研究的新视野。（来源：科学网）

相关论文信息：DOI: 10.1103/PhysRevB.105.174102

作者：雷力等 来源：《物理评论B》

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

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