
压力诱导氮化二钙从金属转变为半导体

作者：闫洁 来源：中国科学报

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/1962.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！

北京高压科学研究中心研究员缙慧阳团队和日本东京工业大学合作，在二维电子化合物——氮化二钙中发现了压力诱导金属向半导体转变的现象，从而为合成新的电子化合物提供了思路。相关结果日前发表于《先进科学》。

电子化合物是一类特殊的离子化合物，其中阴离子是过剩的价电子。松散结合的电子阴离子不依附任何原子和基团。此类化合物特殊的电子行为，使电子化合物在催化、电池和电子领域有着较大的潜在应用前景。

研究人员发现，高压下的氮化二钙会出现3种新的晶体结构，并且晶体结构的转变同时伴随着氮原子配位数的增加。测量表明，常压下金属态的氮化二钙随着压力增加，其电阻缓慢增加，并且在10~20 GPa(1GPa=10⁹帕)之间急剧增加。在约20 GPa时，电阻上升到300欧姆。这意味着压力诱导氮化二钙实现了从金属到半导体的转变。

该团队还对不同结构的氮化二钙电子局域状态进行了理论计算。研究表明，随着压力增加，高压相结构中电子阴离子的分布由二维转变为一维。随着压力的进一步增加，阴离子电子被完全分离开，并且局域在零维的笼子里。正是这种高压下阴离子局域化的重新分布，导致了半导体特性的出现。(来源：中国科学报 闫洁)

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