金属所等发现首个反常庞压卡材料体系

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/22014.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！

金属所等发现首个反常庞压卡材料体系。
庞压卡效应的发现为构建零碳制冷新技术提供了全新的技术路线。自2019年该效应被发现以来，中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心功能材料与器件研究部持续开展相关研究工作，在制冷应用探索方面取得了系列重要进展。科研人员先后发现了碘化铵【*Nature Communicaitons* 13, 2293 (2022)】、碳硼烷【*Advanced Functional Materials* 32, 2112622 (2022)】、六氟磷酸钾（*Materials Horizons*, DOI：10.1039/D2MH00905F）等性能优异的新体系，同时，进行了制冷样机的概念设计。近期，金属所与北京高压科学研究中心研究员李阔团队、上海交通
大学教授林尚
超团队等合作，发现了首个
反常庞压卡材料体系——硫氰酸铵（NH_4SCN）。相比于正常压卡效应（加压放热、卸压吸热），反常压卡效应表现为加压吸热、卸压放热，颇为罕见。利用反常庞压卡材料可以实现固态制冷，并可构建压力可控储热技术。这一发现将庞压卡材料的应用场景拓展至储热领域。相关研究成果发表在*Science Advances*（DOI：10.1126/sciadv.add0374）上。

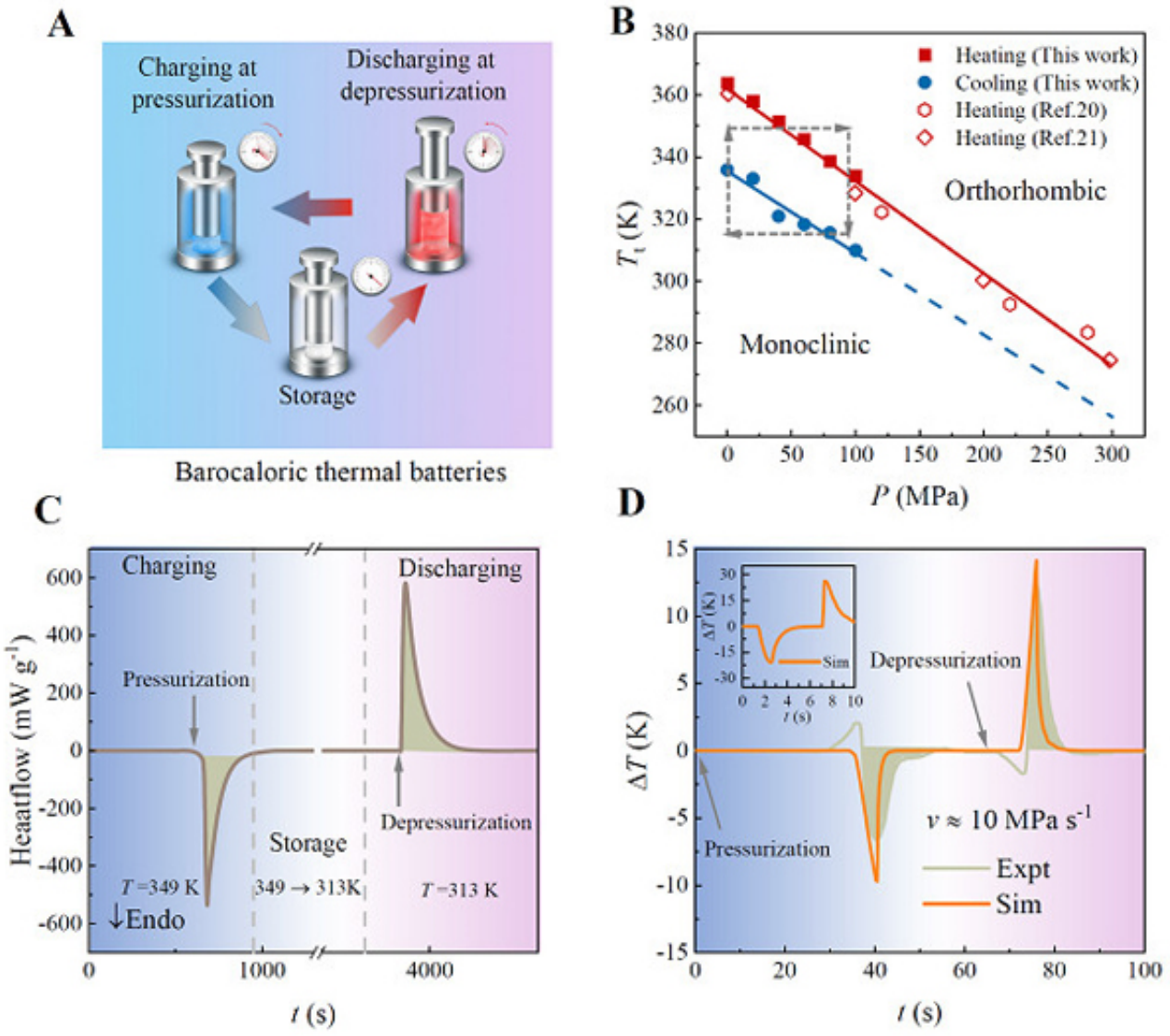
当前的能源利用格局存在尖锐的“热能悖论”。热能生产占全球最终能源消耗的50%以上，并贡献了全球约30%的碳排放量；同时，全球72%的初级能源在转化后又主要以热的形式耗散。如果设法将损失的热能收集、存储，再以热的形式利用，可以提高能源利用率，亦可有效地降低全球碳排放。温度因素的热能调控存在本征热耗散的缺点，且可调可控性较差。因此，非温度外场对热能的调控成为热能利用领域的重要研究课题，受到学术界关注。

本研究利用NH_4SCN的反常压卡效应，实现热能的压力可控。如图A所示，压力可控储热包含三个步骤：材料与热源接触，加压吸热，同时为热源降温；保持压力，热量可长期稳定存储，不随环境温度的变化而耗散；卸压时材料对外放热，实现余热再利用。在加热过程中，该化合物在363 K发生单斜-正交结构相变，同时NH_4^+离子产生取向无序，晶格呈现高达5%的体积负热膨胀，相变熵变达128 $J\ kg^{-1}\ K^{-1}$。该相比也可由压力驱动，饱和压力约为80MPa，相变点随着压力的增加向低温移动（图B）。为验证压力可控储热的实际性能，研究测试了NH_4SCN的热流和温度随压力的变化过程，分别如图C和D所示。卸压过程中放热量为43 $J\ g^{-1}$，温度上升12 K。借助有限元分析方法，在理想绝热条件下最大温升为26 K（图D插图）。

运用原位中子衍射谱、同步辐射X射线衍射和非弹性中子散射技术，结合第一性原理计算和分子动力学模
拟，研究发现压力
对氢键相互作用的抑制是产生反常压
卡效应的根源。在NH_4SCN中，NH_4^+与SCN^-
之间存在大量氢键，且沿SCN^-
垂直方向的分量较大。施加压力后SCN^-
的横向振动幅度变大，削弱了氢键相互作用而导致取向无序，促使塑晶相变的发生。这一压力诱导的原子无序极为反常，与绝大多数物质的高压行为相反。

研究工作得到国家重点研发计划、中科院前沿科学重点研究计划从0到1原始创新项目、中科院国际伙伴计划、中科院建制化研究项目、金属所科研仪器设备研制项目、沈阳市青年科技人才支持计划、国家自然科学基金的资助，并获得SPring-8、CSNS、ANSTO和BSRF等大科学装置机时支持。中国散裂中子源童欣团队、何伦华团队与北京同步辐射光源李晓东团队等参与研究。

[video:庞压卡效应]



基于反常压卡效应的压力可控储热过程

研究团队单位：金属研究所

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转发