
研究提出压力诱导多面体重构物理方法

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/35518.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！

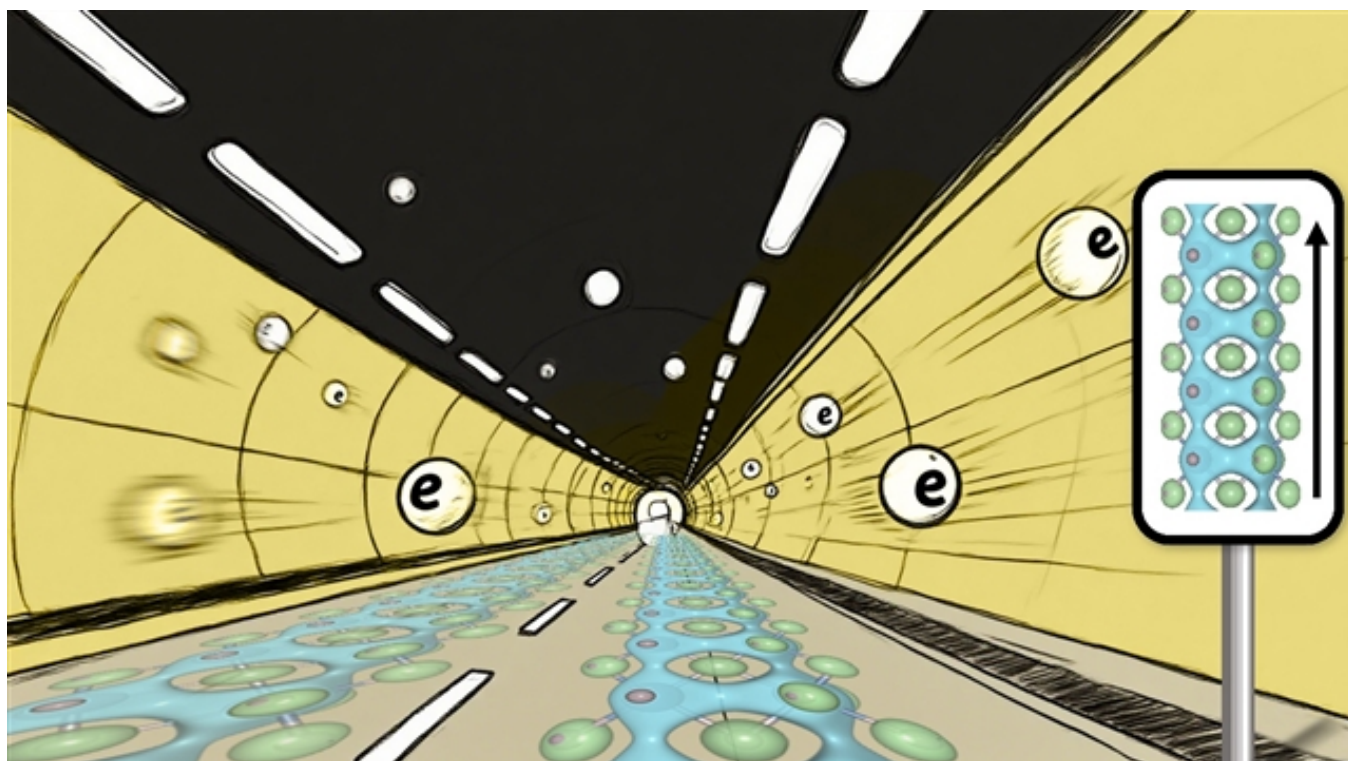
研究提出压力诱导多面体重构物理方法。 吉林大学姚明光教授团队、华南理工大学夏志国教授团队及深圳技术大学申鹏飞助理教授团队合作取得了重要突破，创新性地提出了压力诱导多面体重构（PIPR）物理方法。通过精准调控能带带边特性及载流子动力学，在镓基尖晶石氧化物中首次实现发光性能与载流子传输特性的协同提升。

北京时间2025年9月4日，相关研究成果以Pressure-Induced Polyhedral Reorganization Causes Indirect-to-Direct Band-Gap Transition in Spinel Structure为题在线发表于Physical Review Letters。

深圳技术大学助理教授申鹏飞担任共同第一作者及通讯作者，深圳技术大学硕士研究生徐东浩为共同第一作者，吉林大学姚明光教授担任通讯作者。深圳技术大学为第一完成单位，吉林大学、华南理工大学在理论分析方面提供了重要支持。

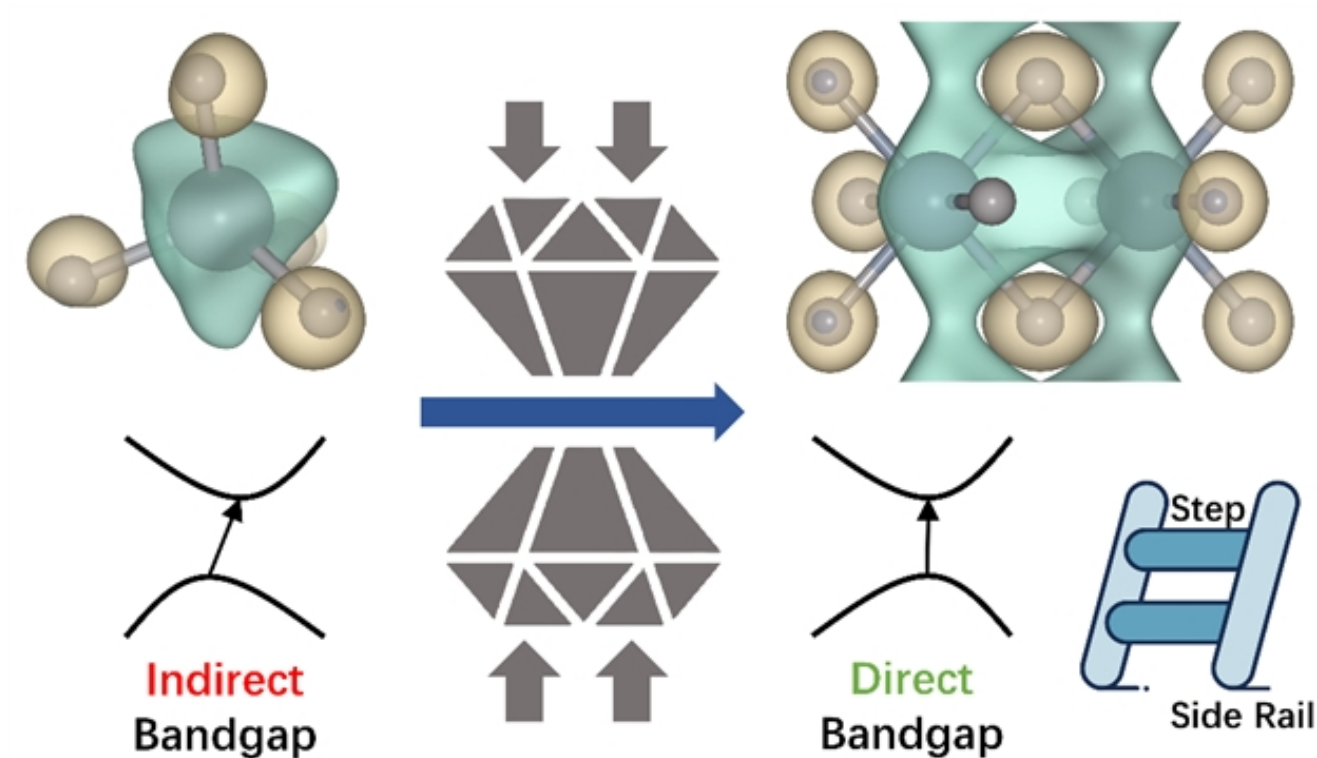
在多功能光电材料研究中，优异的发光性能与卓越的光电特性常难以兼顾，其根本矛盾源于两者工作机制的本质差异：光电转换需要材料产生高度分离的电荷载流子，而发光过程则依赖电子-空穴对的辐射复合。这种对载流子行为的相反要求，构成了光电材料性能协同优化的核心挑战。

那么，这一本质矛盾是否存在有效的破解之道呢？研究团队创新性地提出了压力诱导多面体重构（PIPR）物理方法，为这一长期困扰多功能光电器件发展的关键挑战提供了全新解决方案。



团队进一步揭示了这种多面体重构调控电子结构的深层机制。研究发现，在[GaO₄]四面体向[GaO₆]八面体转变过程中，结构对称性的提升显著增强了多面体中Ga-O键共价性。这种增强的共价性一方面将导致多面体配位氧的p轨道（O-py）能级抬升，推动材料由间接带隙转变为直接带隙，显著提升辐射复合效率；另一方面使价带顶色散关系得到明显改善，使空穴的有效质量降低33%。更为重要的是，多面体配构型的变化进一步引发了多面体连接模式的转变——由原先的点共享结构转变为边共享结构。这种结构演化使Ga原子间距显著缩短，进而诱导相邻Ga原子间产生新的轨道杂化。这种轨道重叠最终构建出独特的梯子状电子传输网络——其横梁沿晶体学a轴取向，立柱沿b轴延伸。这种各向异性结构将电子有效质量降低92%，显著提升了载流子传输性能。

。



通过高压下精准调控多面体几何构型，最后研究团队成功在尖晶石氧化物CGOB（ $\text{CaGa}_2\text{O}_4\text{:Bi}^{3+}$ ）体系中成功实现了光电性能的突破性提升——材料光响应度提高约200%，同时展现出稳定的常压高效白光发射。该工作不仅首次明确建立了 $[\text{GaO}_x]$ 多面体构型演变与电子结构演化的直接构效关系，打破了发光增强必然导致电学性能劣化的传统认知，更提出了压力驱动设计通过调控多面体畸变和旋转角度来精准操纵电子行为的新机制。由此提出的PIPR方法突破了传统掺杂、元素取代及热处理的局限性，为新型可调谐光电材料的设计提供了新思路。这一发现不仅对下一代光电器件开发具有重要指导意义，推动了材料结构-性能关系的理论认知，并建立了高压相常温常压稳定化和可预测性材料设计的理论框架。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1103/v4x6-hksk>

作者：姚明光等 来源：《物理评论快报》

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