发现高压下二氧化硫的非晶多形态相变

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/9072.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！

发现高压下二氧化硫的非晶多形态相变。近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所极端环境量子物质中心团队利用金刚石对顶砧加压装置研究了高压下二氧化硫的物性，首次在二氧化硫中发现了压力诱导的可逆非晶多形态相变，相关研究成果以Pressure-induced amorphization and existence of molecular and polymeric amorphous forms in dense SO2 为题发表在《美国国家科学院院刊》（PNAS）上。

二氧化硫是一种简单的分子气体，在工业生产、地球物理和大气环境中都起着重要的作用。与氮气、氧气和二氧化碳等常见气体不同，二氧化硫是弯曲的极性分子，在高压下会呈现出不同的性质和相图。在本工作中，科研人员发现压力会诱导二氧化硫非晶化，并且存在两种高压非晶相：分子非晶相（二配位的硫）和聚合物非晶相（三配位的硫）。这是首次在二氧化硫体系中发现的非晶多形态。

固体所极端环境量子物质中心研究人员利用金刚石对顶砧这一高压装置将二氧化硫加压至60GPa，结合低温手段，并利用拉曼光谱、同步辐射X射线衍射等技术，获得了0-60GPa压力区间77-300 K温度区间的相变以及结构信息。在温度为77K路径下，当施加的压力低于16GPa时，二氧化硫处于晶体相。加压到16GPa后，二氧化硫开始了压力诱导的非晶化相变，从晶体相进入分子态的非晶相（二配位的硫）。进一步加压到26GPa，二氧化硫发生了从分子非晶相（二配位的硫）到链状的聚合非晶相（三配位的硫）的相变。通过不同温度路径的实验，发现在77-300K整个温度区间二氧化硫都遵从晶体相—分子态非晶相—聚合物非晶相的相变路径，而且该相变路径可逆，进一步研究发现不同温度路径下的非晶化相变压力有所不同，但保持在10-16GPa之间。研究人员通过分子动力学模拟也验证了该相变路径，并且发现分子非晶相到聚合物非晶相的相变实质上是二氧化硫分子中的S原子从二配位变为三配位，从而形成了链状的聚合物。研究人员通过实验和理论手段的完美结合，证实了二氧化硫体系中存在非晶多形态。

高压下物质的晶体相之间发生结构相变比较常见，而非晶相之间的相变非常少见。有些材料具有多种非晶相，而且不同非晶相之间可以发生转换，称为非晶多形态相变。非晶多形态在1984年在水/冰体系中发现，系为低密度的非晶冰（LDA）和高密度的非晶冰（HDA），随后在二氧化硅、硅和二氧化锗等体系中也发现非晶多形态。在凝聚态物理中，非晶多形态现象十分有趣，但是发现此现象的体系还较少，研究尚不系统深入。此工作不仅为非晶多形态现象提供了一个新的实例，并为理解其他材料的非晶态相变提供了参考。

该工作得到国家自然科学基金、中科院国际访问学者项目、中科院创新基金、院长基金等支持。（来源：中国科学院合肥物质科学研究院）

相关论文信息：https://doi.org/10.1073/pnas.1917749117

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“ 来源 ”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费等事宜，请与我们接洽。
作者：Xiao-Di Liu 来源：PNAS

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