



中心系列讲座 ICQM Weekly Seminar Series
“高压下典型单质与化合物的奇异新结构与新性质”



Prof. Yanming Ma 马琰铭
Jilin University

Time: 4:00pm, Apr. 6, 2011 (Wednesday)

时间: 2011年4月6日 (周三) 下午4:00

Venue: Room 607, Conference Room A, Science Building 5

地点: 理科五号楼607会议室

摘要

高压可以有效地改变物质内部原子间的相互作用, 诱导高压结构相变的发生, 形成高压新相, 为发现新现象、发展新理论提供有效途径。高压研究的核心问题之一是如何确定高压相的结构。超高压下, 实验往往难以获得高质量的XRD谱, 这给实验确定高压相结构带来了困难。马琰铭博士研究组最近发展了基于粒子群优化算法的晶体结构预测新技术, 在只给定材料化学组分和外界条件(如压力)下, 可以合理确定材料的晶体结构[1], 并基于粒子群优化算法编制了具有自主知识产权的晶体结构预测CALYPSO程序[2]。利用晶体结构预测技术结合高压实验, 马琰铭博士发现了多种高压相结构, 获得了奇特的高压效应。本次报告主要讨论: 1) 发现金属钠在200万大气压下相变为具有奇特双六角密排结构的宽带隙半导体, 这是首次发现的金属转变为绝缘体的高压范例 [3]; 2) 提出了一种碳的新型同素异形体, 单斜超硬结构(M-碳), 是后石墨高压相结构的重要候选[4]; 3) 利用CALYPSO技术确定了金属锂的高压绝缘相结构, 得到后续实验的证实[5]; 4) 利用CALYPSO技术确定了碲化铋的高压相结构, 并实验发现碲化铋在高压下形成了奇特的替代合金[6]。

参考文献

- [1] Y. Wang, J. Lv, L. Zhu, and Y. Ma*, Phys. Rev. B 82, 094116 (2010).
- [2] Y. Ma*, Y. Wang, J. Lv, and L. Zhu, <http://nlshm-lab.jlu.edu.cn/calypso.html>.
- [3] Y. Ma*, et al., Nature 458, 182 (2009).
- [4] Q. Li, et al., Phys. Rev. Lett. 102, 175506 (2009).
- [5] J. Lv, Y. Wang, L. Zhu, and Y. Ma*, Phys. Rev. Lett. 106, 015503 (2011).
- [6] L. Zhu, et al., Phys. Rev. Lett. (in press, 2011).

报告人简介

2001年毕业于吉林大学, 随后到加拿大科学院, 苏黎世高等工业大学, 日本理化所, 香港大学进行博士后和访问研究。长期从事高压下凝聚态物质的新结构与新效应等方面的理论和实验研究, 研究成果“金属钠在高压下转化为透明绝缘体”入选2009年中国基础研究十大新闻, 国家十一五重大科技成就展。马琰铭博士获得国际高压科学与技术协会授予的“高压科学杰出青年学者奖—Jamieson Award”, 获得教育部高等学校自然科学一等奖(第一完成人)、国家杰出青年基金、第十届吉林省青年科技奖, 入选教育部新世纪优秀人才、吉林省杰出青年研究计划, 吉林省第十一批有突出贡献的中青年专业技术人才、香港大学崔琦学者(Daniel Tsui Fellow), 任Nat Mater、PRL等30余种SCI期刊评审人, 近年来在Nature、PRL、PNAS等期刊发表130余篇SCI收录论文