

高温高压下黄铁矿电导率及拉曼研究

柳凯祥^{1,2}, 代立东^{1*}, 李和平¹, 胡海英¹, 庄毓凯^{1,2},
杨林飞^{1,2}, 蒲畅^{1,2}, 洪梅玲^{1,2}

(1. 中国科学院 地球化学研究所 地球内部物质高温高压重点实验室, 贵州 贵阳 550081; 2. 中国科学院大学, 北京 100049)

金刚石压腔技术是高温高压下原位测量地球内部矿物、材料物理性质极为有效的手段。近些年来, 中国科学院地球内部物质高温高压重点实验室的代立东研究团队将金刚石对顶砧高压设备与电化学交流阻抗谱、拉曼光谱、透射图谱、原子力图谱、第一性原理计算等多种手段有机结合, 对包括金属硫化物在内的多类型的矿物、材料进行了深入探索和研究^[1-6]。本次工作中, 我们利用金刚石压腔结合阻抗谱、拉曼、ICPMS 系统的研究了黄铁矿在高温压下的电学和谱学性质。研究表明, 在固定压力的条件下, 黄铁矿的电导率随温度的升高而增大, 表现出典型的半导体特性。在温度不变的条件下, 黄铁矿的电导率随压力的增大而增大, 并且增速在约 13 GPa 明显提高。这种没有体现在拉曼光谱上的电导率变化被认为是一种电子结构相变。前人的研究表明, 天然与合成黄铁矿的电子运输特性主要受微量元素的影响, 比如 As, Ni, Co 以及 Cu。本次工作利用了 ICPMS 测量了实验样品微量元素的含量。同时我们计算的样品常压下的激活能约为 0.045 eV, 这与微量元素 Co 引入的杂质能级相符 (~1/2 ED)。这样我们就得出了一个黄铁矿在高压下的电子运输模型: 压力小于 13 GPa 时, 电导率的增加是由于随着压力的增大, 原子之间距离靠近, 电子轨道波函数交叠程度增加, 能带展宽, 能隙变窄。处于导带底的 Co 杂质能级扩散到导带参与传导, 这种杂质能级的压力效应引起的附加载流子, 是电导率随压力升高而线性上升的根本原因。压力大于 13 GPa 时, 随着带隙变窄, 费米能级穿过杂质能级, 电离发生并且更多的激发电子扩散到导带参与导电, 这是 13 GPa 之后电导率随压力升高而急剧增大的原因。

参 考 文 献:

- Dai Lidong, Wu Lei, Li Heping, et al. 2016. Evidence of the pressure-induced conductivity switching of Yttrium-doped SrTiO₃. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28: 475501.
- Dai Lidong, Zhuang Yukai, Li Heping, et al. 2017. Pressure-induced irreversible amorphization and metallization with a structural phase transition in arsenic telluride. *Journal of Materials Chemistry C*, 5: 12157–12162.
- Dai Lidong, Liu Kaixiang, Li Heping, et al. 2018. Pressure-induced irreversible metallization with phase transitions of Sb₂S₃. *Physical Review B*, 97: 024103.
- Liu Kaixiang, Dai Lidong, Li Heping, et al. 2018. Migration of impurity level reflected in the electrical conductivity variation for natural pyrite at high temperature and high pressure. *Physics and Chemistry of Minerals*, 45: 85–92.
- Zhuang Yukai, Dai Lidong, Wu Lei, et al. 2017. Pressure-induced permanent metallization with reversible structural transition in molybdenum disulfide. *Applied Physics Letters*, 110: 122103.
- Zhuang Yukai, Dai Lidong, Li Heping, et al. 2018. Deviatoric stresses promoted metallization in rhenium disulfide. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51: 165101.

基金项目: 中国科学院先导专项 (XDB 18010401); 中国科学院前沿科学重点项目 (QYZDB-SSW-DQC009); 中国科学院地球化学研究所“135”项目; 中国科学院 A 类百人计划项目; 国家自然科学基金项目 (41474078、41774099 和 41772042)

作者简介: 柳凯祥, 男, 1991 年生, 博士研究生, 高温高压下矿物材料电导率研究。

* 通讯作者, E-mail: dailidong@vip.gyig.ac.cn