

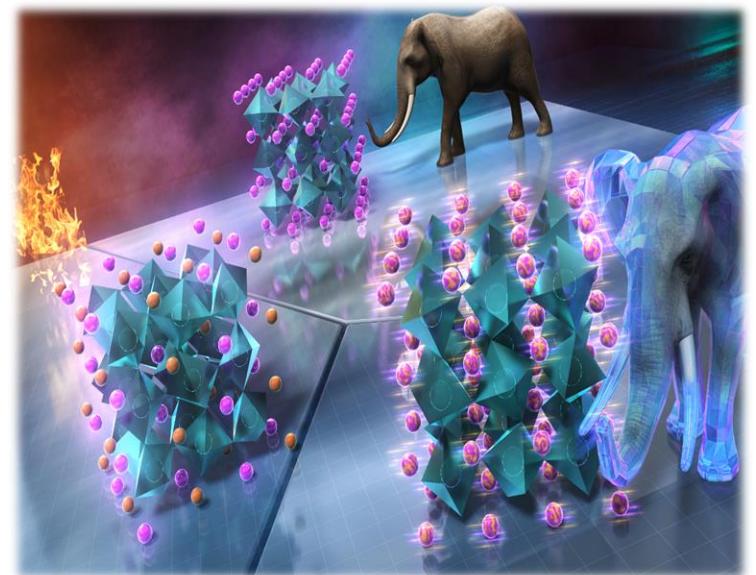
壓力「攪亂」電荷秩序： 新穎機能性材料中的電荷非晶化

Pressure-Induced Charge Amorphisation in BiNiO_3

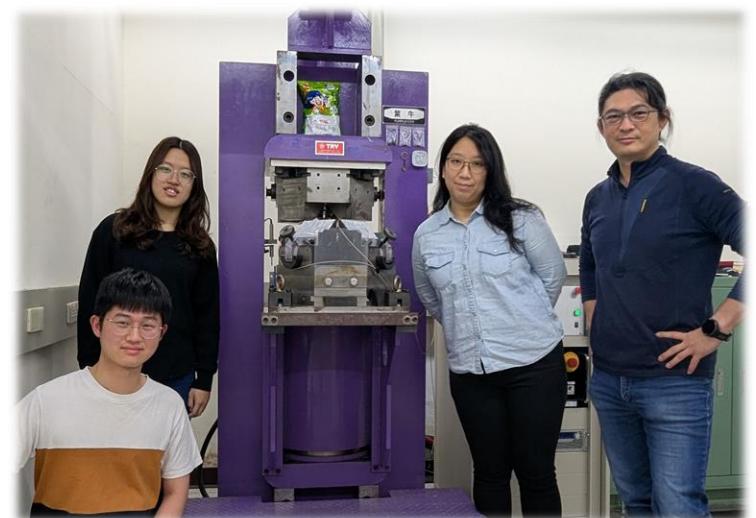
晶體材料的性質與其內部結構息息相關—原子、離子或分子的有序排列，以及材料內部電荷的規律排列，決定了材料的電性、磁性、機械以及光學特性等。近期對鈣鈦礦鉍鎳氧化物 BiNiO_3 的研究揭示了一種獨特現象：該材料需在高壓高溫（HPHT）環境下製備，在常溫常壓下，其結構中 Bi^{3+} 與 Bi^{5+} 離子呈現少見的柱狀有序排列，而在對其施加 3 GPa 以上的外加壓力時，這種有序性開始「熔化」，導致電荷在 Bi 與 Ni 離子間發生轉移並改變排列樣貌。當壓力進一步提高至 4~5 GPa，且溫度降至 200 K 以下時，原本的電荷結構徹底崩潰，形成無序的「電荷玻璃」狀態，顯示出該材料在極端條件下的特殊電荷行為。

當此材料在高壓環境下升溫時，再度轉變為金屬態並伴隨體積縮小（而非常見的熱脹冷縮）—即 Negative Thermal Expansion 負熱膨脹現象。這一系列壓力、溫度與電性的微妙關聯，源自於材料中電荷轉移（Charge Transfer）、電荷不均化（Charge Disproportionation）與電荷非晶化（Charge Amorphisation）等相變化，而其隨之觀察到的負熱膨脹以及磁熱效應（Magnetocaloric Effect）等現象，為設計新型功能性材料開闢了新的應用可能性。

本研究由凝態中心（CCMS）陳威廷博士主持，在國科會補助「尖端晶體材料開發及製作計畫（TCECM）」與教育部特色領域研究中心計畫「新穎材料原子級科學研究中心（AI-Mat）」支持下與國際團隊合作完成，於 2025 年 3 月發表於 *Nature Communications* 期刊。陳威廷博士所率領之高壓先端材料研究室（PRESS Lab），提供極為少見的 HPHT 合成設施：利用數萬大氣壓超高壓力（GPa，相當地表下數百公里）與超過攝氏一千度高溫，進行特殊亞穩態材料製備，輔以晶體結構與電荷有序說明特殊物性起源，進一步以原子級設計進行細部功能調控。

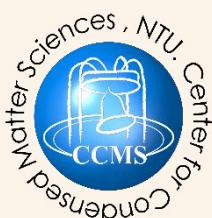


BiNiO_3 材料在不同壓力溫度區間的晶體結構與電荷有序排列示意圖。



陳威廷博士率領之高壓先端材料研究室與高壓高溫 HPHT 合成設備—紫牛。

AI-Mat



研究成果全文



PRESS LAB