
固体物理所在高压下氨-氦化合物研究方面取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10253.html>

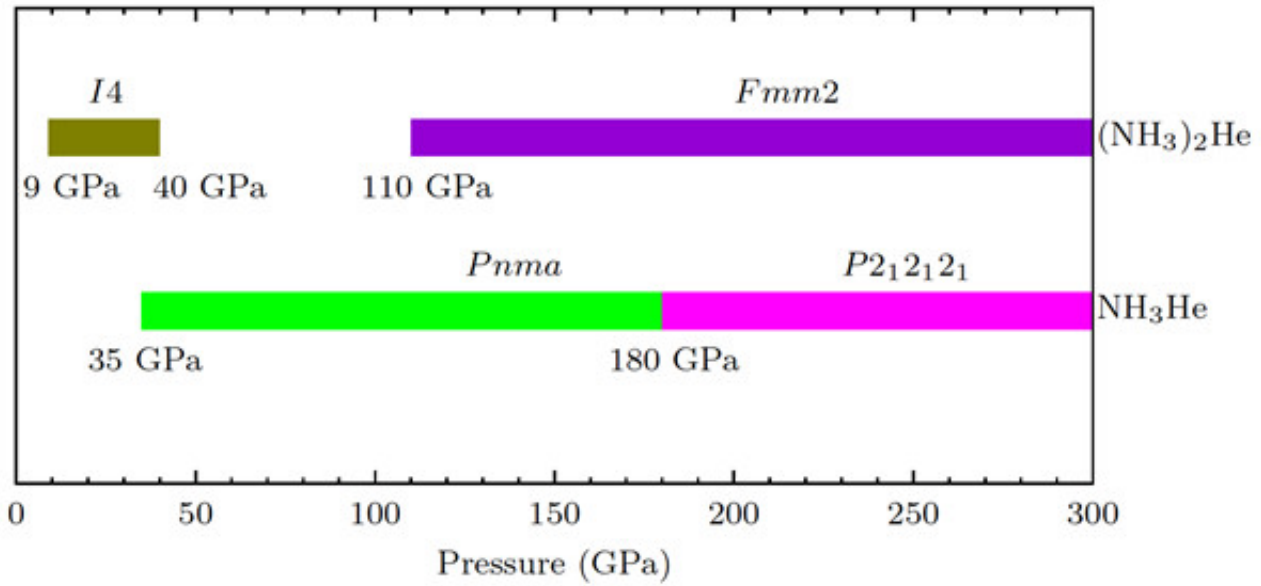
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所计算物理团队研究员王贤龙与江苏师范大学教授李印威合作，采用第一性原理方法、基于粒子群优化算法的全局结构搜索方法和分子动力学方法研究了高压下氨-氦化合物的物性，预测了系列稳定的氨-氦高压化合物，指出氨并不像人们普遍认为的只存在于天王星和海王星的大气中，也可能大量存在于其上地幔中。相关成果以Formation of ammonia-helium compounds at high pressure为题发表在《自然-通讯》上。氦是宇宙中含量第二的元素，占宇宙总质量的23%，仅次于氢。氦是一种惰性气体元素，很难与其他元素形成化合物，地球上的氦主要以气体形式存在于天然气和放射性矿石中，含量非常稀少，属于稀有气体。研究发现天王星和海王星的大气中存在大量氦气。因为氦是惰性气体元素，所以人们普遍认为在天王星和海王星等冰巨星的地幔中是不存在氦元素的。

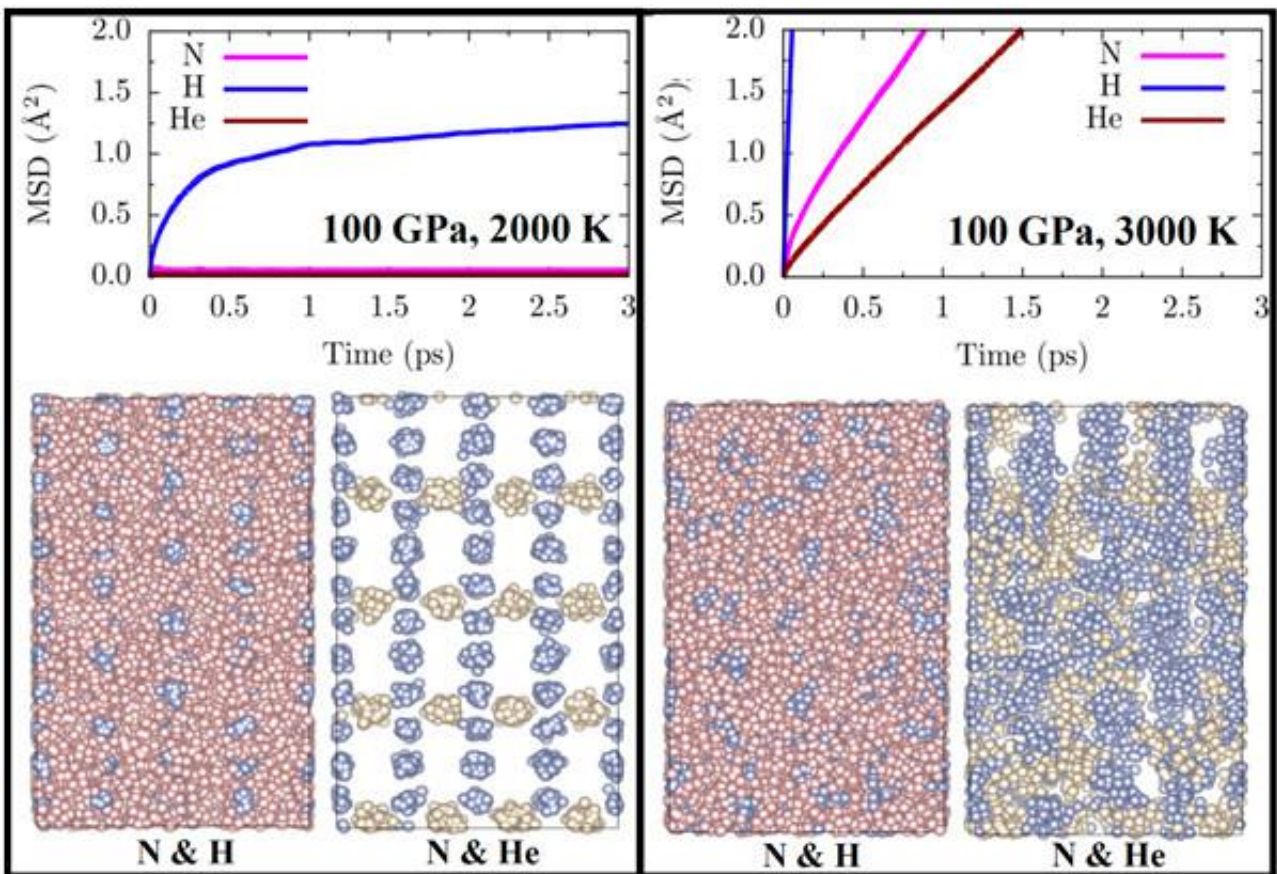
团队通过计算模拟得到了氨-氦在0~300GPa和0~5000K温压条件下的相图，结果显示，氨和氦在9GPa压力下就能形成稳定的 $(\text{NH}_3)_2\text{He}$ 化合物，在9~300GPa的压力范围内可以形成四种稳定的氨-氦化合物。有趣的是在Fmm2- $(\text{NH}_3)_2\text{He}$ 相中发生了由 NH_3 到 $(\text{NH}_2)^-$ 和 $(\text{NH}_4)^+$ 的分解，H、He和N随着温度的升高会依次进入快速移动状态，展现出丰富和复杂的相变行为，而且Fmm2- $(\text{NH}_3)_2\text{He}$ 相在天王星和海王星的下地幔温压范围内也能够以超离子态与液态混合的形式存在，说明氦也可能普遍存在于天王星和海王星的上地幔中。此工作加深了对高压下氦化合物结构和物性的认识，对人类认知冰巨星具有重要意义。

该工作得到了国家自然科学基金和挑战计划等项目的支持。

[论文链接](#)



压力下氨-氦化合物的相图



分子动力学计算的 $Fmm2$ - $(\text{NH}_3)_2\text{He}$ 相在不同温压条件下的均方差位移和原子移动轨迹

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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](http://www.iikx.com)转发