
合肥研究院发现新型氢水化合物

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12155.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！

近日，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理所计算物理与量子材料研究部极端环境量子物质中心团队，在高压科学研究取得新进展，研究利用金刚石对顶砧高压实验技术，结合原位拉曼光谱实验技术、原位X射线衍射实验技术及第一性原理，计算研究了一种新型氢水化合物的形成过程以及结构性质。相关研究成果以Novel Hydrogen Clathrate Hydrate为题，发表在《物理学评论快报》（Physical Review Letters）上。

固态水分子由于氢键的存在倾向于形成三维框架结构。在自然或人造的极端条件下，水分子很可能与其他气体小分子发生缔合，从而产生各种各样的构型和结构。纯水在低于400万大气压以及77-300K的温度压力区间，以存在至少3种非晶相及16种晶相而闻名，具有非常复杂的相图。这种结构的多样性也适用于不同的水合物。气体分子可以通过范德华力与水的笼型结构的相互作用，形成稳定的气体水合物，使得水本身成为具有潜力的储气/气体分离的材料，例如，在深海沉积物等中存在大量的天然气水合物。然而，氢水合物在行星的形成和演化中起重要作用。

研究表明，在120万大气压和298K温度下，纯氢与纯水形成一种新型水合物，水合物中氧原子亚晶格的排布与纯水的固体相中氧原子相同，而水合物中的氢分子位于氧原子构成的六环形空腔中，整个水合物的空间对称性满足三角R3c或R-3c空间群（质子有序或无序），其分子式组成为 $(\text{H}_2\text{O}) \cdot 6\text{H}_2$ 。

拉曼光谱和理论计算揭示了研究发现的 C_1 新相中的氢无序性质，其不同于众所周知的有序相 C_1 ，这种新结构在压力升高或温度降低后会转变为 C_1 相。它也可以被看作是有序冰的无序结构，与其他所有已发现的有序冰结构（如ice I与ice II，ice III与ice IV）均不同，是一种新型无序冰结构。

研究工作得到国家自然科学基金、国家重大科研仪器研制、科学挑战专题及院长基金等的支持。

[论文链接](#)

图2.水合物 C_1

在R-3c对称性下的结构，其中主要结构模型（ H_2O 环）以不同的投影显示，显示出两种不同的无序模式，“环状”无序（在由六个氧原子构成的类似扶手椅的虚拟平面）和“无环”（平面外）无序

图3. C_1

相的粉末衍射数据。红色短刻度对应于R-3c空间群，蓝色短线对应R-3（与ice 相同）结构的空间群

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