合肥研究院实验呈现半水合氨分子结构到完全离子化结构相变路径

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/12364.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研究所与英国爱丁堡大学等合作，利用金刚石对顶砧加压装置研究高压下半水合氨的物性，首次在半水合氨中发现压力诱导的分子晶体至完全离子结构相变，相关研究成果以*Ionic Phases of Ammonia-Rich Hydrate at High Densities*为题，发表在《物理学评论快报》（*Physical Review Letters*）上。

自然界中稳定存在的氨水化合物根据氨与水比例的不同可分为一水合氨、二水合氨及半水合氨。研究表明，常温时含水量高的氨水化合物在高压下均会脱水，形成半水合氨及多余的冰。现阶段建立的物质相图多由分子相占主导地位，近年来，随着研究向更极端条件的扩展，奇异的离子相、超离子相逐渐进入人们的视野。然而，关于半水合氨体系的相关研究仍停留在理论预测阶段。

该研究通过拉曼光谱探测，结合同步辐射X射线衍射技术及第一性原理计算，对超过120万大气压（相当于天王星/海王星约9870/8085km深处压力）的半水合氨样品开展研究。结果显示，半水合氨样品在高压下会经历分子结构-部分离子化-完全离子化的转变，随着压力不断增大，最终在压力高于69GPa条件下进入一个新的结构状态，即稳定的完全离子化结构。表明样品中的水在压力作用下完全去质子化。该研究首次报道了半水合氨中由压力诱导的分子结构到完全离子化结构相变路径，在较大范围内扩展了半水合氨的相图。

天王星和海王星等巨型冰行星内部含有大量的
NH_3、H_2O、CH_4
，以及各种形式的氢，在冰行星内部极端条件如超高压力下，半水合氨将大量存在。该研究呈现了半水合氨中在随压力变化作用下，从分子结构到完全离子化结构路径，对进一步了解冰行星的形成及演化具有重要的指导作用。

研究工作得到国家自然科学基金、中科院、合肥研究院院长基金等的支持。

论文链接

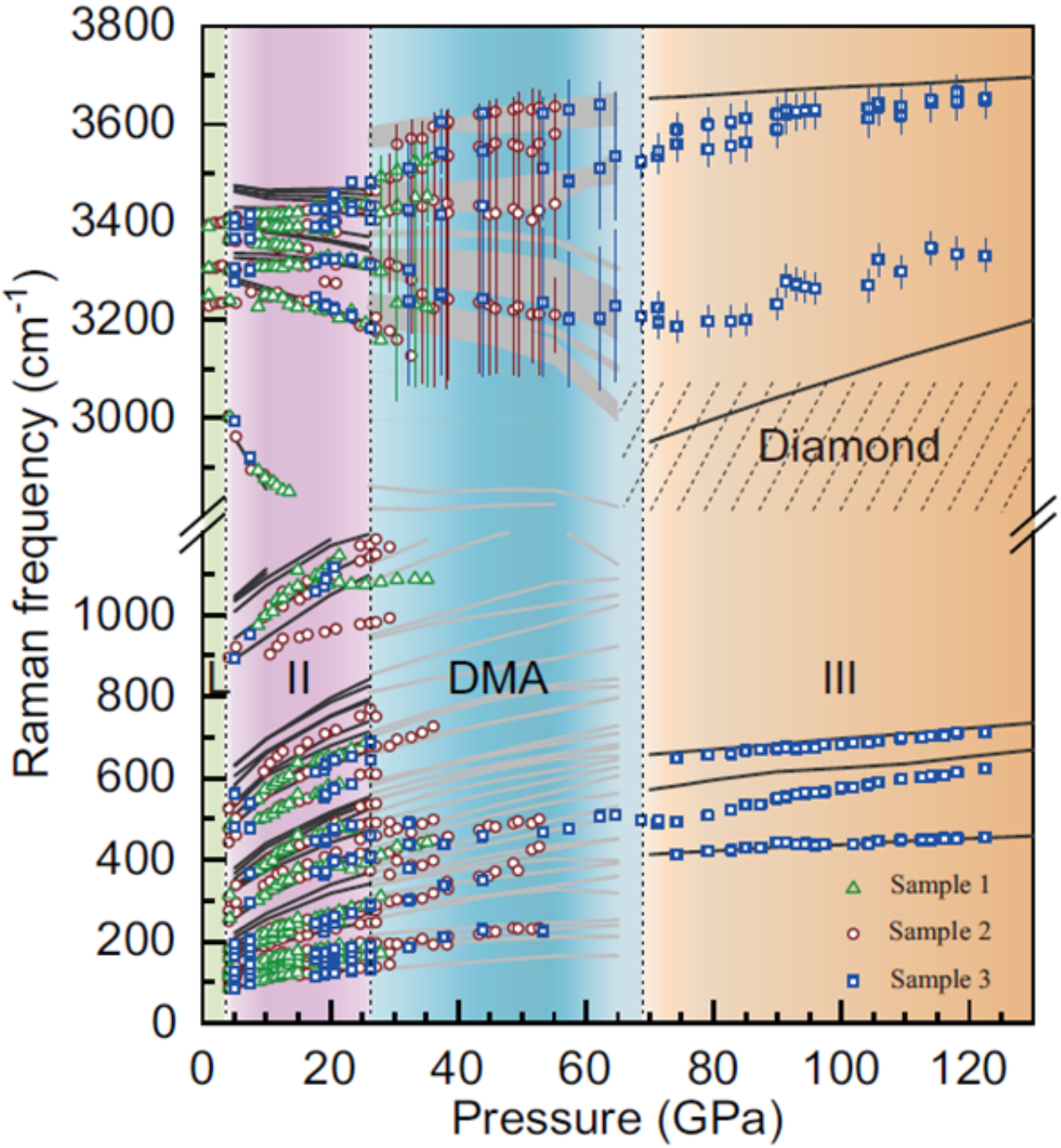


图1.实验以及DFPT理论计算半水合氨拉曼峰频率随压力变化图

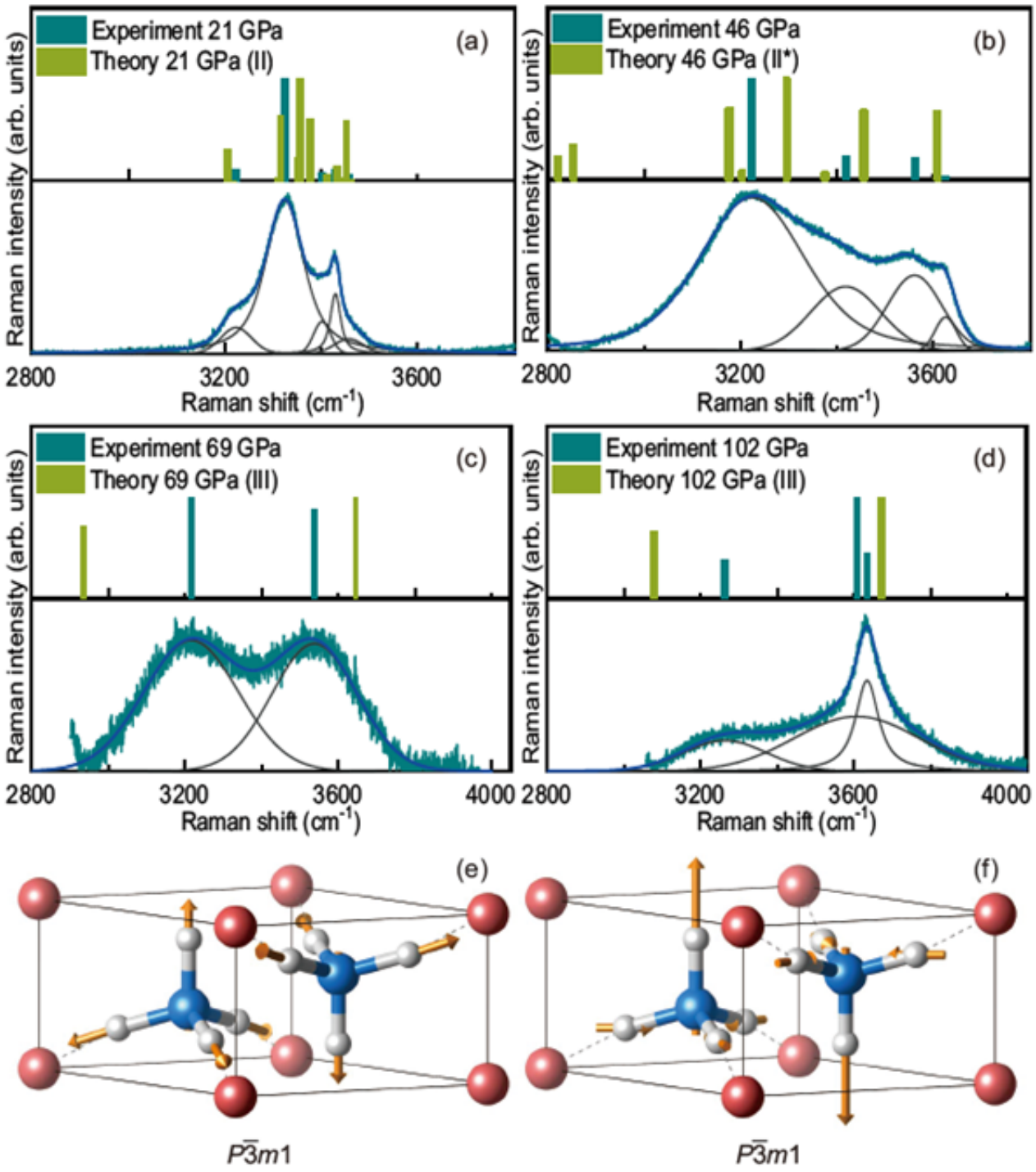


图2.(a)-(d) 下部分为不同压力下的拉曼实验光谱拟合结果，上部分为拟合峰强度与理论计算峰强度对比图；(e)-(f)分别为100GPa时相III具有拉曼活性的低频以及高频N-H振动

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转发