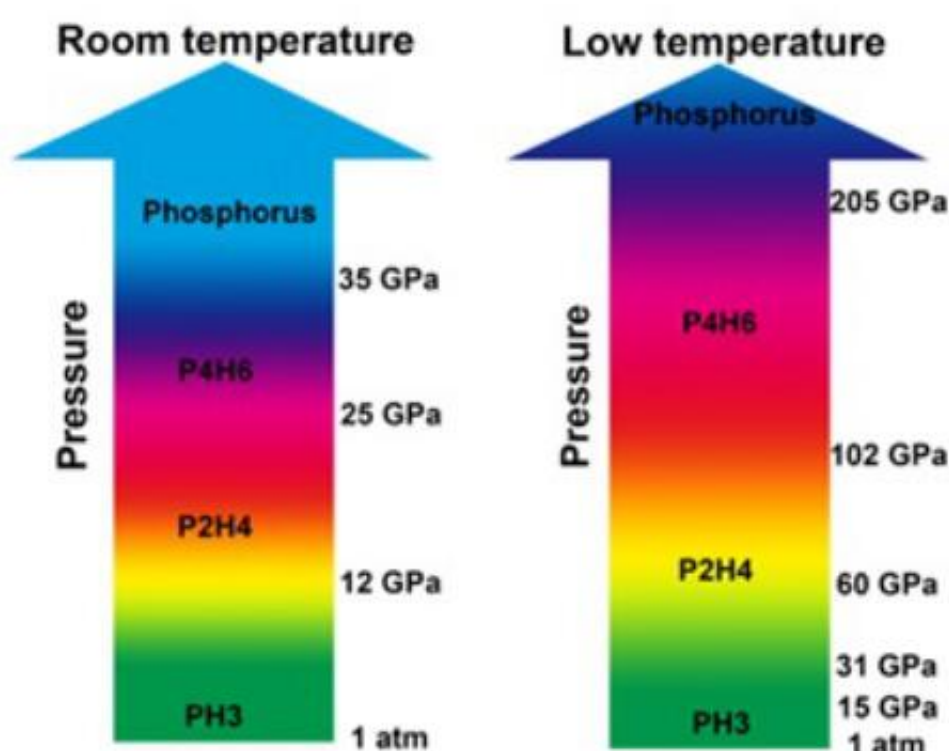


高压200GPa，PH₃分子结构如何变？

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6432.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！



PH₃ 在室温及低温条件下的高压相图

高压200GPa，PH₃分子结构如何变？氢化物是高温超导领域的新星。2015年，德国马普所Drozdov等人发现，在超高压条件(155 GPa)下硫化氢(H₂S)可以在203.5 K(-70 °C)温度下实现超导。2018年，Somayazulu等人发现，高压条件下的LaH₁₀可以在260 K(-13 °C)表现出超导迹象，这一成绩已经接近室温超导的圣杯。

那么，在高压条件下，氢化物的结构到底发生了哪些改变?为什么它们可以在较高温度下获得超导性能?

为回答这些问题，北京高压科学研究中心王霖教授课题组和江苏师范大学、温州大学、及上海应用物理研究所等多个单位合作，以磷烷(PH₃)为研究对象，结合原位高压实验和第一性原理计算

，对PH₃在高压下的结构和化学计量比的演化进行了细致研究。相关研究结果在线发表于《国家科学评论》(National Science Review)，文章题为Stoichiometric evolutions of PH₃ under high pressure: implication for high T_c superconducting hydrides。

金刚石对顶砧高压原位测量技术显示，在室温条件下，PH₃只可以稳定保持到11.7 GPa，之后发生二聚反应生成P₂H₄；在25 GPa，P₂H₄会再次聚合生成P₄H₆；当压力高于35 GPa，P₄H₆会最终分解为磷单质和氢气。

而低温条件下，磷氢化合物在高压下的聚合和分解可以被有效抑制。在205 GPa高压下，P₄H₆分子依然能稳定存在。

Calypso软件计算结果表明，高压条件下，P₄H₆存在两种可能的稳定结构：Cmcm结构和C2/m结构，二者分别在不同压力下更加稳定。这两种结构的P₄H₆都可以在高压下转变为超导体，其中，C2/m结构P₄H₆在200 GPa计算的T_c值为67 K，这一结果与实验温度相符。

以上实验和计算结果，可以为氢化物超导机制的研究提供方向。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwz010>

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](https://www.iikx.com)转发