



超离子态冰的弹性异常性质研究

孙士川^{1,2}, 何宇^{1,3*}, Duck Young Kim³, 李和平^{1,*}

1、中国科学院地球内部物质高温高压重点实验室, 中国科学院地球化学研究所,
贵阳, 贵州, 550081, 中国;

2、中国科学院大学, 北京 100049;

3、北京高压科学研究中心, 上海 201203;

*E-mail: heyu@mail.gyig.ac.cn 和 liheping@vip.gyig.ac.cn

2019年最新发表在 *nature* 上的文章[1], Millot 等人首次以用激光束实验上合成验证了超离子态冰的存在。超离子态冰的性质对于我们认知地球及行星内部结构有着重要的作用, 然而超离子结构物质弹性高温下随温度变化的性质却从未报道过。我们利用第一性原理分子动力学计算调查了超离子态冰 ice X 和 ice XVIII 在 200 GPa 和高达 4500 K 温度条件下的弹性性质和波速。Ice X 中晶格格点离域的质子导致了随着温度明显的弹性软化。2000 K 时, ice X 到 ice XVIII 的相转变导致了质子扩散的明显增加和弹性软化。在 ice XVIII 中我们同时观察到了随着温度从 2000 K 增加到 2000 K 的弹性强化, 这和一些液体的行为相类似。温度高于 3000 K 时, 所有的弹性常数都急剧的下降。我们的结果表明质子的扩散对弹性性质有着非常重要的影响, 同时超离子态冰表现出随着温度增加不同于普通固体的弹性性质。

参考文献:

- [1] M. Millot, F. Coppari, J. R. Rygg, A. C. Barrios, S. Hamel, D. C. Swift, and J. H. Eggert, (2019) Nanosecond X-ray diffraction of shock-compressed superionic water ice. *Nature* 569, 251.