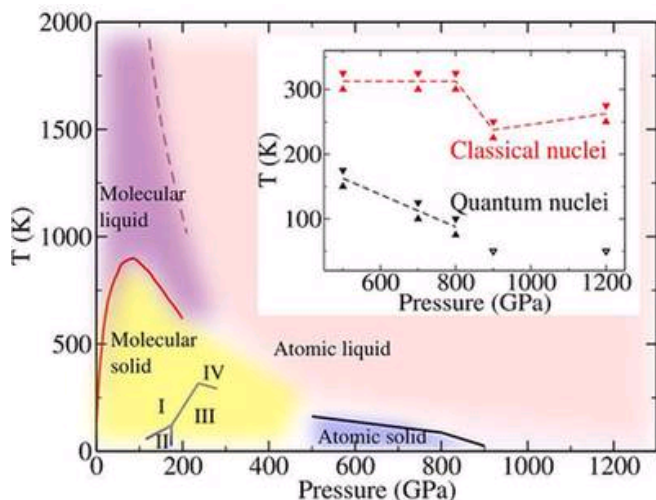


[高级搜索](#)

《自然-通讯》报道李新征、王恩哥在氢相图研究领域的重要进展

日期：2013-07-15 信息来源：物理学院

《自然-通讯》(Nature Communications)最近发表了物理学院李新征、王恩哥与博士生陈基等的合作文章“Quantum simulation of low-temperature metallic liquid hydrogen” [Nature Communications 4, 2064 (2013)]. 该文章首次报道了分子模拟中的高压低温液态氢这种奇特的物质, 并且利用理论模拟手段证明了这种物质形态的存在根源是氢原子核自身的核量子效应。



氢相图一直被认为是高压物理研究领域的圣杯(引自McMahon et al. Rev. Mod. Phys. 84, 1607 (2012))。有关其新奇性质, 存在诸多假说。最著名的两个分别是来自Wigner和Huntington的金属氢假说以及来自Ashcroft的低温液体的假说。由这些假说启发, 人们对氢的相图展开了很多理论和实验方面的研究。目前, 金属氢虽然在实验上还没有被直接观测到, 许多间接证据已对其在高压下的存在提供了很大程度的支持。而由Ashcroft提出的低温液体的假说, 因其对实验和理论模拟两个方面都更为严苛的要求, 目前这方面的研究进展还很小。

在这篇文章中, 陈基等通过第一性原理电子结构计算与路径积分分子动力学方法的结合, 对这个问题展开了系统的研究。结果表明由于氢原子核本身的核量子效应, 在900GPa到1200GPa之间, 氢可能以一种低温金属液体的形式存在。这个结论与此前仅考虑将氢原子核本身进行经典处理的传统方法完全相反, 将人们对氢相图的认识大大推进了一步, 同时对高压物理的基础研究也具有重要意义。

此工作的第一作者为王恩哥的博士生陈基, 通讯作者为李新征和王恩哥。其他作者包括北京航空航天大学的张千帆副教授、英国伦敦大学学院的Angelos Michaelides教授、Chris Pickard教授、剑桥大学的Richard Needs教授、约克大学的Matthew Probert博士。这项研究得到了国家自然科学基金委、国家科技部等的资助。

编辑：剡溪

[\[打印页面\]](#) [\[关闭页面\]](#)

转载本网文章请注明出处



[本网介绍](#) | [设为首页](#) | [加入收藏](#) | [校内电话](#) | [诚聘英才](#) | [新闻投稿](#)

投稿地址 E-mail: xinwenzx@pku.edu.cn 新闻热线: 010-62756381
北京大学新闻中心 版权所有 建议使用1024*768分辨率 技术支持: 方正电子