

Ученые предсказали невиданную молекулу в недрах Урана и Нептуна, которая влияет на магнитное поле планет

Исследование опубликовано в журнале *Physical Review B*. Магнитные поля Урана и Нептуна до сих пор вызывают у ученых куда больше вопросов, чем поля Юпитера, Сатурна и Земли. Источник магнетизма в недрах нашей планеты — циркуляция жидкого электропроводящего железоникелевого сплава. Считается, что подобным образом поля Юпитера и Сатурна порождает циркулирующий на большой глубине водород, который при столь высоких давлениях и температурах переходит в металлическое состояние и тоже обладает электронной проводимостью.

Предполагается, что магнитные поля Урана и Нептуна вызваны циркуляцией вещества, для которого характерна не электронная, а ионная проводимость. Иными словами, не электроны, а электрически заряженные атомы или молекулы — то есть ионы — сами направленно движутся и тем самым переносят электрический заряд. Какие именно ионы и в каком соотношении циркулируют в недрах ледяных гигантов — пока неясно. И здесь может крыться часть разгадки того, почему их магнитные поля так необычны: сильно отклонены от осей вращения этих планет и исходят не из их центров.

Один из авторов посвященного акводию исследования, профессор Сколтеха Артем Оганов, поясняет различие между двумя типами проводимости — и причем тут новый ион: «В условиях, которые существуют в недрах Юпитера, водород становится жидким металлом, его электропроводность обусловлена наличием свободных электронов, которые все атомы водорода сбрасывают „в общий котел“ при столь сильном сжатии. А в Уране, как мы предполагаем, сами ионы водорода, то есть протоны, переносят заряд. При этом совершенно не обязательно в форме свободных ионов H^+ , а, например, в виде гидроксония H_3O^+ , аммония NH_4^+ и ряда других ионов. Наше исследование дополняет этот ряд ионом $H_4O_2^+$, химия которого представляет большой интерес».

Гибридизациями в химии называют стандартные варианты совмещения двух и более электронных орбиталей атома, на основании которых можно получить своего рода шаблоны молекул и молекулярных ионов с участием этого атома. Один из таких шаблонов имеет форму правильного тетраэдра, в центре которого располагается атом с так называемой sp^3 -гибридизацией — например, углерод, азот или кислород. А в каждой из четырех вершин — либо валентный электрон, либо целая электронная пара, которая самодостаточна и не участвует в формировании нормальных (ковалентных) связей с другими атомами. Простейший пример — атом углерода с четырьмя валентными электронами по вершинам тетраэдра. Если добавить четыре атома водорода, получится молекула метана CH_4 .

У кислорода на внешней электронной оболочке уже есть две укомплектованные электронные пары в добавок к двум одиночным валентным электронам, поэтому

«шаблон» sp^3 -гибридизации реализуется так: две вершины тетраэдра заняты электронными парами, а в оставшихся двух валентные электроны могут образовать связи с атомами водорода — получится молекула воды H_2O . Если к одной из «родных» электронных пар кислорода присоединить протон, то есть лишенный собственного электрона атом водорода, то получится ион гидроксония H_3O^+ — кстати, именно его концентрацией в действительности определяется водородный показатель (известный как pH) водных растворов, ведь выделяемые кислотами в раствор протоны тут же присоединяются к молекулам воды.

«Вопрос был в том, можно ли к гидроксонию присоединить еще один протон и получить недостающее звено в этой цепи? В нормальных условиях такая конфигурация чрезвычайно невыгодна с энергетической точки зрения, но наши расчеты говорят, что она реализуется при выполнении двух условий, — рассказывает профессор Сяо Дун из Нанькайского университета (Китай), идея которого легла в основу работы. — Во-первых, нужно высокое давление, которое вынуждает вещество уменьшить свой объем, и тут разделить неиспользованную электронную пару кислорода с еще одним ионом водорода — хороший выход. Получается как бы третья ковалентная связь с водородом, только оба электрона в ней — от кислорода. И второе условие: нужно много свободных протонов, то есть сильноокислая среда».

Авторы опубликованного в Physical Review B исследования использовали самые современные методы моделирования, чтобы понять, как вода и плавиковая кислота поведут себя в экстремальных условиях. При давлении порядка 1,5 млн атмосфер и температуре 3 тыс. градусов Цельсия в симуляции стали четко различимы ионы акводия $H_4O_2^+$.

Ученые считают, что открытый таким образом новый ион может влиять на поведение и свойства водных сред, в частности кислых сред под большим давлением. Условия, о которых идет речь, примерно соответствуют тому, чего можно было бы ожидать от Урана и Нептуна, где немыслимая толща водного океана оказывает колоссальное давление на глубинные слои вещества и присутствие кислот тоже возможно. А значит, должен образовываться акводий, который будет циркулировать вместе с другими ионами и делать свой вклад в магнитные поля этих планет. Быть может, он даже участвует в формировании неизвестных нам земных минералов, устойчивых в экстремальных условиях. Освещенное в пресс-релизе исследование поддержано грантом Российского научного фонда.