高压物理学报

高压下惰性元素氦化合物的研究进展

田艺帆 刘寒雨

Progress on Compounds of Inert Element Helium under High Pressure

TIAN Yifan, LIU Hanyu

引用本文:
田艺帆, 刘寒雨. 高压下惰性元素氦化合物的研究进展[J]. 高压物理学报, 2023, 37(3):030101. DOI: 10.11858/gywlxb.20230635
TIAN Yifan, LIU Hanyu. Progress on Compounds of Inert Element Helium under High Pressure[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2023, 37(3):030101. DOI: 10.11858/gywlxb.20230635

在线阅读 View online: https://doi.org/10.11858/gywlxb.20230635

您可能感兴趣的其他文章
Articles you may be interested in

高压下Ir_2P晶体结构预测与物理性质

Evolution of Crystal Structures and Electronic Properties for Ir_2P under High Pressure

高压物理学报. 2019, 33(1): 011103 https://doi.org/10.11858/gywlxb.20180645

基于第一性原理计算IrSb压力相变

Pressure-Induced Phase Transformations of IrSb from First-Principles Calculations

高压物理学报. 2019, 33(5): 052203 https://doi.org/10.11858/gywlxb.20190716

高压下MgN_8晶体结构理论模拟与物性研究

Theoretical Simulation and Physical Properties of MgN_8 Crystal Structure under High Pressure

高压物理学报. 2020, 34(1): 011102 https://doi.org/10.11858/gywlxb.20190818

压力和碳含量调控BC_xO化合物物理性质的机理研究

Mechanism of Pressure and Carbon Content Regulating Physical Properties of BC_xO Compounds

高压物理学报. 2021, 35(6): 061101 https://doi.org/10.11858/gywlxb.20210792

结合能的新势函数对高压稠密惰性元素压缩特性的影响

A Novel Expression of Cohesive Energy Contributions to the Highly Compressed Characteristic for Rare-Gas Solids

高压物理学报. 2019, 33(6): 062201 https://doi.org/10.11858/gywlxb.20190731

氧族氢化物的压致金属化与奇异超导电性

Pressure-Induced Metallization and Novel Superconductivity of Chalcogen Hydrides

高压物理学报. 2018, 32(1): 010102 https://doi.org/10.11858/gywlxb.20170629

DOI: 10.11858/gywlxb.20230635

高压下惰性元素氦化合物的研究进展

田艺帆[1,2,3], 刘寒雨[1,2,3]

（1. 吉林大学物质模拟方法与软件教育部重点实验室, 吉林 长春 130012;
2. 吉林大学超硬材料国家重点实验室, 吉林 长春 130012;
3. 吉林大学物理学院, 吉林 长春 130012）

摘要: 氦（He）是元素周期表第 2 号元素, 也是宇宙中除氢以外含量最丰富的元素, 广泛存在于恒星和气态巨行星（gas giant planets）的内部高压强（高压）极端环境中。氦因其满壳层的电子结构具有极强的化学惰性, 极难与其他元素结合形成化合物。近年来, 多项研究工作表明, 惰性氦在极端高压条件下具有“不简单”的物理行为, 如通过计算“预言”了在高压下稳定的铁氧氦化合物 FeO_2He 和具有反常原子传播的水氦化合物 $He\text{-}H_2O$ 等。这些研究工作不仅有助于发现新的化学成键范式, 也有力推动了高压物理、地学和行星科学等相关领域的研究进展。本文重点介绍了高压下氦化合物的相关研究进展, 聚焦讨论氦化合物在高压下稳定的物理机制, 并对未来在高压下设计和制备新型氦化合物的相关研究进行展望。

关键词: 晶体结构预测; 高压; 惰性元素氦化合物

中图分类号: O521.2 **文献标识码:** A

首先, 本文作者刘寒雨衷心感谢中国物理学会高压物理专业委员会的支持及肯定, 有幸入选 2022 年第三届“高压科学卓越青年学者”, 在这里也非常感激马琰铭教授在科研道路的有力指引, 感谢 John S. Tse、Russell J. Hemley 和 Changfeng Chen 等在科研方面的关心帮助, 与此同时, 也感谢各位同行前辈的大力支持; 其次, 感谢《高压物理学报》的邀请, 此文将重点介绍高压下惰性元素氦化合物的研究进展, 并借此机会汇报课题组在惰性元素氦化合物方面的高压物理研究工作; 最后, 谨以此文献给吉林大学物理学科建立 70 周年, 文中如有不当之处, 敬请批评指正。

惰性元素（He、Ne 和 Ar 等）的外层电子具有满壳层结构, 其化学性质极为稳定, 难与其他元素发生化学反应形成化合物。1962 年, Bartlett[1] 合成了首个惰性元素化合物 $Xe^+[PtF_6]^-$, 打破了惰性元素不能与其他元素发生化学反应的传统认知, 激发了人们对惰性元素化合物的研究热情。后续研究也表明, 这些惰性元素在常压下仍难于形成稳定的化合物, 尤其是元素周期表中第 1 个惰性元素氦, 因其具有极为稳定的电子结构, 难以形成稳定的氦化合物。压强是一个独特的物理学参量, 宇宙星体内部均处于极端高压强（高压）条件下。从物质结构的微观角度出发, 高压可以减小原子间距, 诱发原子间的电荷转移, 改变原子的化学价态, 诱导形成常规条件下无法形成的新型化合物[2–4]。于是, 科研工作者们尝试利用高压等极端条件调控氦的化学惰性, 诱导形成新型氦化合物。

近年来, 惰性元素化合物在高压下的研究获得了多项重要进展。令人欣慰的是, 我国科学家自主开发的结构搜索方法及软件（如 CALYPSO[5–7]、MAGUS[8] 等）在高压惰性元素化合物领域的研究中发

* **收稿日期:** 2023-04-03; **修回日期:** 2023-04-20
基金项目: 国家自然科学基金（12074138）; 吉林省科技发展计划项目（YDZJ202102CXJD016）
作者简介: 田艺帆（1997—）, 女, 博士研究生, 主要从事极端高压下的计算凝聚态物理研究. E-mail: tianyifan0101@163.com
通信作者: 刘寒雨（1984—）, 男, 博士, 教授, 主要从事极端高压下的计算凝聚态物理研究. E-mail: lhy@calypso.cn

挥了重要作用, 大量相关原创理论工作引领了后续的重要实验发现, 获得了多个创新性研究成果。例如, 吉林大学马琰铭课题组利用 CALYPSO 软件理论预测了在地核温度和压强条件下稳定的铁氙和镍氙化合物 Fe_3Xe 和 Ni_3Xe[9], 预测了首个在地球内部压强条件下稳定的铁氧氦化合物 FeO_2He[10] 等, 其中 Fe_3Xe 和 Ni_3Xe 在后续实验中成功制备[11], 为解决“氙气消失之谜”提供了新思路; 南京大学孙建教授课题组利用 MAGUS 软件预测了新型氦水化合物[12], 并且通过加温计算发现, 较重元素 He 首先发生原子传播, 打破了较轻元素在加温过程中首先发生原子传播的传统认知。

这些新型惰性元素化合物的研究不仅有助于发现新的化学成键范式, 也有力地推动了高压物理、地球科学以及行星科学等相关领域的研究进程。一方面, 惰性元素因其不易与地球内部矿物发生化学反应, 所以常作为示踪元素; 另一方面, 氦元素大量存在于冰巨行星内部, 并且处于高温高压状态, 因此研究氦与其他矿物在行星内部温压条件下的化学反应以及形成的新型矿物对于理解行星内部的结构和演化具有重要的科学意义。本文将重点介绍高压下氦化合物的相关研究进展, 首先聚焦论述氦化合物在高压下稳定的物理机制, 然后讨论氦化合物在行星科学中的应用, 最后对未来在高压下设计和制备新型氦化合物的相关研究作出展望。

1　“不简单”的氦化合物及其稳定机制

氦是宇宙中除氢以外含量最丰富的元素, 是恒星和气态巨行星(gas giant planets)的重要组成元素。氦的原子核外仅有一个 s 轨道, 被两个电子满占据。因此, 氦原子的电离能高达 24.59 eV, 这也导致氦的化学性质极为稳定, 极难与其他元素结合形成化合物。尽管如此, 近年来的研究工作发现了惰性氦在高压条件下“不简单”的物理行为, 例如: Loubeyre 等[13] 在 13 GPa、296 K 条件下合成了 $Ne(He)_2$, 研究分析表明该化合物主要以 He-Ne 范德华键结合; 2017 年, Dong 等[14] 计算发现了 113 GPa 下的 Na_2He 化合物, Bader 计算表明 He 并未发生电子转移, 这表明氦并不参与化学成键。

为了研究氦化合物在高压下稳定的物理机制, 2018 年, Liu 等[15] 通过计算发现, 氦化合物的稳定机制来源于氦的电子屏蔽, 这种电子屏蔽可以有效降低同种电荷之间的静电相互作用, 改善体系的热力学稳定性。与阴阳离子数量相等的离子化合物(如化学式为 AB 型化合物)相比, 一些离子化合物(如化学式为 A_2B 或 AB_2 型化合物)的阴阳离子数不平衡, 其体系中的静电势(马德龙能)起主导作用(图 1)。由于 A_2B 或 AB_2 型化合物具有较小的离子半径和显著的化学惰性, 当这些离子化合物中掺入氦后, 不参与化学成键的氦可以利用其有效的库伦屏蔽作用降低不利于体系稳定的静电排斥。通过后续计算进一步验证了该机制是否可以解释其他氦化物的稳定性, 发现高压下 MgF_2He 是稳定的, 而 LiFHe 和 MgOHe 是不稳定的。不仅如此, 在极端高压下, 由于原子间距离缩小, 库伦屏蔽对体系的影响更大, 也使得氦化合物更加稳定。

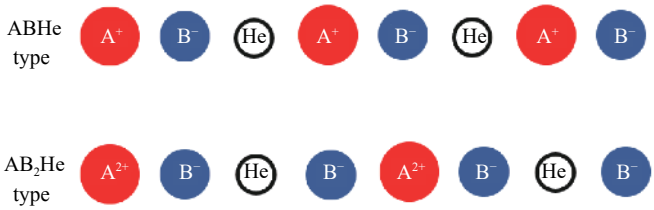

图 1　He 原子插入 AB 和 AB_2 型离子化合物的一维示意图(红色大圆圈代表带有 1 或 2 个正电荷的离子, 蓝色小圆圈代表带有 1 个负电荷的离子, 白色圆圈代表氦原子)

Fig. 1　One-dimensional schematic diagrams of He atom insertion in AB and AB_2 ionic compounds (The large and red filled circles represent the ions with +1 or +2 charges, the small and blue filled circles represent the ions with –1 charge, the white circles represent the neutral helium atoms.)

2　氦化合物在行星科学中的相关研究进展

氦元素因其化学惰性常被作为追踪地球早期原始成分的示踪原子。例如, 氦具有两种稳定的同位素 ^{3}He 和 ^{4}He, ^{4}He 可以由地球深部的放射性元素 Th、U 衰变形成; 而 ^{3}He 只能在地球形成过程中被捕获, 也称原始氦。根据地球形成模型, 原始氦在地球内部的占比较低, 但通过收集地球不同火山口 ^{3}He/^{4}He 比值的观测数据发现, 与由熔融上地幔形成的洋中脊玄武岩相比, 下地幔具有较高的 ^{3}He/^{4}He 比值, 表明地球深部可能存在原始氦库, 这便引出了系列相关的科学问题: 氦在地球内部是如何存在的[16−18]? 如果氦可以大量存在, 氦以什么形式存在? 针对这些重要问题, 我们通过晶体结构预测软件预测了大量地球深部可能与氦结合形成的矿物[18−20]。化合物, 计算发现, 在 120 GPa 下, FeO_2 与 He 可形成一种热力学稳定的化合物 FeO_2He[10]。进一步的高温高压相图计算结果表明, 该化合物可能存在于核幔边界处。不仅如此, 该化合物的声速下降计算结果与地震学观测数据基本一致, 这为理解下地幔超低速区的形成提供了新思路。前期研究表明, Fe–O–H(FeOOH 或 $FeOOH_x$)也可能存在于地球内部[20−21], 结合本文作者提出的 FeO_2He 开展了后续 Fe–O–H–He 体系的相关结构搜索[22], 计算发现了一种新的四元化学配比 FeO_2H_2He, 该研究结果也为探究地球内部氦的储存形式提供了研究思路, 即氢元素和氦元素不能形成二元稳定化合物, 但是可以借助 Fe、O 元素形成新型四元化合物。

天王星和海王星是太阳系中一类典型行星, 因其矿物类型独特, 被称为冰巨星。相关研究表明, 冰巨星的内部构造包含以氦为主要物质的大气层和处于高温高压条件下的“热冰”层, 包括约 56%H_2O、36%CH_4 和 8%NH_3[23], 这激发了科学界研究 He 与 H_2O、CH_4 和 NH_3 在高温高压下化学反应以及形成氦化合物的热度。2015 年, 利用晶体结构预测方法和相关软件, 在超过 300 GPa 的压强下, 预测了新型氦水化合物 $(H_2O)_2He$, 其中 O–He 是以类氢键的形式结合[24]。同年, Teeratchanan 等[25] 也发现, 氦可以在较低压强下填充冰块中的空隙。2019 年, Liu 等[12] 发现, 在低于 100 GPa 时, He 与 H_2O 可发生作用并以范德华键形成氦化合物。不仅如此, 理论预测结果也表明, 冰层中的另外两种主要物质 NH_3 和 CH_4 均可以在高压下与氦结合形成新型氦化合物[26−28]。除此以外, 一些理论工作还发现, He 与 SiO_2、Fe、CO_2 等在极端高压强下可能发生化学反应形成新的化合物[29−33]。由于这些矿物也是“超级地球”内部的主要成分, 因此, 这些计算结果也对研究“超级地球”内部的组成成分有进一步的启示。

由于行星内部也处于高温状态, 后续理论计算也模拟了一些预测结构在高温下的动力学行为, 令人惊讶的是, 这些化合物中的氦元素呈现“不简单”的类流体传播行为。如在 H_2O-He 体系中, 发现氦的原子扩散温度要低于氢的原子扩散温度, 这显然与物理直觉相反, 因为氦的原子质量大于氢的原子质量[8]。后续理论分析对该现象作出如下解释: He 与 H_2O 的相互作用要弱于 H 与 O 的共价相互作用, 因此, 氦的原子扩散温度要低于氢的原子扩散温度。除此以外, 在一些其他氦化合物中也发现了类流体的原子扩散行为, 如预言的 FeO_2H_2He 相在地幔深处 2 000～3 000 K、75～100 GPa 的温压条件下, 氢原子也会出现类流体的扩散行为[22]。这些计算结果对于理解行星内部的演化过程和物质交换以及能量传递也将发挥重要的作用。

3　氦辅助制造新材料

2004 年, 德国马克斯•普朗克化学研究所 Eremets 等[34] 成功制备出具有氮单键结合形式的聚合氮材料 *cg*-N。该材料的理论能量密度极高, 也被称为“氮炸药”。但是, 该材料的合成压强极高(超过 110 GPa), 并且该材料无法通过卸压保留至常压。由于氦的化学惰性, 人们尝试将氦引入含氮晶体中, 即通过氦的“化学压强”作用, 在较低的压强下获得了热力学稳定的聚合氮[35]。江苏师范大学 Li 等[36] 利用晶体结构预测方法设计了一种新型四方相聚合氮材料, 其能量密度(11.31 kJ/g)高于此前实验合成的聚合氮材料 *cg*-N(9.7 kJ/g)。不仅如此, 后期 Ding 等[37] 还利用氦的化学惰性, 计算设计了亚稳态的直接带隙半导体材料 Si。这些研究表明, 氦的高压化学性质可能比我们想象的更加丰富, 因此, 期望在高压下利用氦的化学惰性设计和制备出更多的新型功能材料。

4 结论与展望

综上所述, 在极端高压条件下, 晶体结构预测方法及软件的发展和完善对于惰性元素氦化合物的研究起到了关键作用, 相关研究也取得了若干重要进展。尽管如此, 下面 3 个研究方向仍然值得继续深入探索: (1) 尚未发现存在氦原子参与成键的化合物, 即氦原子不存在电子转移。某些强氧化或强还原性物质能否在高压下与氦反应, 形成具有惰性元素化学键的氦化合物。(2) 尽管一些氦化合物已被理论预言或实验制备在高压下稳定存在, 但其稳定压强仍然远高于早期的地核压强(约 50 GPa), 难以解释在早期地球演化过程中, 如核幔分异过程中, 氦是如何保留下来的。(3) 尽管氦在常温常压下主要以单质形式存在, 但是在行星内部的高压环境中可能存在数量可观的氦化合物, 如果能通过计算和实验发现新型氦化合物, 不仅有望为行星深层矿物的探索提供参考, 还有助于进一步理解行星内部的物质结构。

三元甚至更多元氦化合物可能具有更多稳定的化学计量配比和晶体结构, 尤其在高压下可能形成常压下所不具备的反常化学计量配比和结构, 这种引入其他元素的方法为在较低压强下发现惰性元素氦化合物提供了更多可能性。例如, 通过具有类似问题的惰性元素氙化合物的研究发现, 预测 FeO_2Xe_2 的稳定压强低于 Fe_3Xe 的稳定压强[38]。不仅如此, 在行星演化过程中, 矿物成分更为复杂, 形成多元惰性元素化合物的可能性更高。尽管如此, 多元素惰性氦化合物的搜索空间相比二元氦化合物更大, 搜索稳定结构的难度也更大。但是笔者相信, 随着越来越多的优秀人才乐于投入到国产计算方法和软件的研发中, 必将有力推动相关方法和软件的创新与发展, 如基于人工智能的大尺度与高计算精度的神经网络势、图对称性理论搜索等。相信在不久的将来, 通过将这些先进算法引入到晶体结构的搜索研究中, 实现三元以及更多元惰性元素氦化合物的智能设计和预测, 人们也必将在相关研究方面获得更多的进展和突破。

参考文献:

[1] BARTLETT N. Xenon hexafluoroplatinate (V) $Xe^+[PtF_6]^-$ [J]. Proceedings of the Chemical Society London, 1962(6): 197–236.

[2] ZHANG L J, WANG Y C, LV J, et al. Materials discovery at high pressures [J]. Nature Reviews Materials, 2017, 2(4): 17005.

[3] MIAO M S. Noble gases in solid compounds show a rich display of chemistry with enough pressure [J]. Frontiers in Chemistry, 2020, 8: 570492.

[4] MIAO M S, SUN Y H, ZUREK E, et al. Chemistry under high pressure [J]. Nature Reviews Chemistry, 2020, 4(10): 508–527.

[5] WANG Y C, LV J, ZHU L, et al. CALYPSO: a method for crystal structure prediction [J]. Computer Physics Communications, 2012, 183(10): 2063–2070.

[6] WANG Y C, LV J, ZHU L, et al. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization [J]. Physical Review B, 2010, 82(9): 094116.

[7] SHAO X C, LV J, LIU P, et al. A symmetry-orientated divide-and-conquer method for crystal structure prediction [J]. The Journal of Chemical Physics, 2022, 156(1): 014105.

[8] XIA K, GAO H, LIU C, et al. A novel superhard tungsten nitride predicted by machine-learning accelerated crystal structure search [J]. Science Bulletin, 2018, 63(13): 817–824.

[9] ZHU L, LIU H Y, PICKARD C J, et al. Reactions of xenon with iron and nickel are predicted in the Earth's inner core [J]. Nature Chemistry, 2014, 6(7): 644–648.

[10] ZHANG J R, LV J, LI H F, et al. Rare helium-bearing compound FeO_2He stabilized at deep-Earth conditions [J]. Physical Review Letters, 2018, 121(25): 255703.

[11] STAVROU E, YAO Y S, GONCHAROV A F, et al. Synthesis of xenon and iron-nickel intermetallic compounds at Earth's core thermodynamic conditions [J]. Physical Review Letters, 2018, 120(9): 096001.

[12] LIU C, GAO H, WANG Y, et al. Multiple superionic states in helium-water compounds [J]. Nature Physics, 2019, 15(10): 1065–1070.

[13] LOUBEYRE P, JEAN-LOUIS M, LETOULLEC R, et al. High pressure measurements of the He-Ne binary phase diagram at 296 K: evidence for the stability of a stoichiometric Ne(He)$_2$ solid [J]. Physical Review Letters, 1993, 70(2): 178–181.

[14] DONG X, OGANOV A R, GONCHAROV A F, et al. A stable compound of helium and sodium at high pressure [J]. Nature Chemistry, 2017, 9(5): 440–445.

[15] LIU Z, BOTANA J, HERMANN A, et al. Reactivity of He with ionic compounds under high pressure [J]. Nature Communications, 2018, 9(1): 951.

[16] XIONG Z H, TSUCHIYA T, VAN ORMAN J A. Helium and argon partitioning between liquid iron and silicate melt at high pressure [J]. Geophysical Research Letters, 2021, 48(3): e2020GL090769.

[17] RIZO H, WALKER R J, CARLSON R W, et al. Preservation of Earth-forming events in the tungsten isotopic composition of modern flood basalts [J]. Science, 2016, 352(6287): 809–812.

[18] JACKSON M G, CARLSON R W, KURZ M D, et al. Evidence for the survival of the oldest terrestrial mantle reservoir [J]. Nature, 2010, 466(7308): 853–856.

[19] HU Q Y, KIM D Y, YANG W G, et al. FeO_2 and FeOOH under deep lower-mantle conditions and Earth's oxygen-hydrogen cycles [J]. Nature, 2016, 534(7606): 241–244.

[20] NISHI M, KUWAYAMA Y, TSUCHIYA J, et al. The pyrite-type high-pressure form of FeOOH [J]. Nature, 2017, 547(7662): 205–208.

[21] LIU J, HU Q Y, KIM D Y, et al. Hydrogen-bearing iron peroxide and the origin of ultralow-velocity zones [J]. Nature, 2017, 551(7681): 494–497.

[22] ZHANG J R, LIU H Y, MA Y M, et al. Direct H-He chemical association in superionic FeO_2H_2He at deep-Earth conditions [J]. National Science Review, 2022, 9(7): nwab168.

[23] CAVAZZONI C, CHIAROTTI G L, SCANDOLO S, et al. Superionic and metallic states of water and ammonia at giant planet conditions [J]. Science, 1999, 283(5398): 44–46.

[24] LIU H Y, YAO Y S, KLUG D D. Stable structures of He and H_2O at high pressure [J]. Physical Review B, 2015, 91(1): 014102.

[25] TEERATCHANAN P, HERMANN A. Computational phase diagrams of noble gas hydrates under pressure [J]. The Journal of Chemical Physics, 2015, 143(15): 154507.

[26] SHI J M, CUI W W, HAO J, et al. Formation of ammonia-helium compounds at high pressure [J]. Nature Communications, 2020, 11(1): 3164.

[27] LIU C, GAO H, HERMANN A, et al. Plastic and superionic helium ammonia compounds under high pressure and high temperature [J]. Physical Review X, 2020, 10(2): 021007.

[28] GAO H, LIU C, HERMANN A, et al. Coexistence of plastic and partially diffusive phases in a helium-methane compound [J]. National Science Review, 2020, 7(10): 1540–1547.

[29] SHEN G Y, MEI Q, PRAKAPENKA V B, et al. Effect of helium on structure and compression behavior of SiO_2 glass [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2011, 108(15): 6004–6007.

[30] SATO T, FUNAMORI N, YAGI T. Helium penetrates into silica glass and reduces its compressibility [J]. Nature Communications, 2011, 2: 345.

[31] LI D, LIU Y, TIAN F B, et al. High-pressure structures of helium and carbon dioxide from first-principles calculations [J]. Solid State Communications, 2018, 283: 9–13.

[32] MONSERRAT B, MARTINEZ-CANALES M, NEEDS R J, et al. Helium-iron compounds at terapascal pressures [J]. Physical Review Letters, 2018, 121(1): 015301.

[33] DING S C, ZHANG P, YANG K, et al. Formation of solid SiO_2He compound at high pressure and high temperature [J]. Physical Review B, 2022, 106(2): 024102.

[34] EREMETS M I, GAVRILIUK A G, TROJAN I A, et al. Single-bonded cubic form of nitrogen [J]. Nature Materials, 2004, 3(8): 558–563.

[35] HOU J Y, WENG X J, OGANOV A R, et al. Helium-nitrogen mixtures at high pressure [J]. Physical Review B, 2021, 103(6): L060102.

[36] LI Y W, FENG X L, LIU H Y, et al. Route to high-energy density polymeric nitrogen *t*-N via He−N compounds [J]. Nature Communications, 2018, 9(1): 722.

[37] DING S C, SHI J M, XIE J H, et al. Helium incorporation induced direct-gap silicides [J]. npj Computational Materials, 2021,

7(1): 89.

[38] PENG F, SONG X Q, LIU C, et al. Xenon iron oxides predicted as potential Xe hosts in Earth's lower mantle [J]. Nature Communications, 2020, 11(1): 5227.

Progress on Compounds of Inert Element Helium under High Pressure

TIAN Yifan[1,2,3], LIU Hanyu[1,2,3]

(1. *Key Laboratory of Material Simulation Methods & Software of Ministry of Education*, *Jilin University*, *Changchun* 130012, *Jilin*, *China*;
2. *State Key Laboratory of Superhard Materials*, *Jilin University*, *Changchun* 130012, *Jilin*, *China*;
3. *College of Physics*, *Jilin University*, *Changchun* 130012, *Jilin*, *China*)

Abstract: Helium (He), the second element in the periodic table, is the most abundant element in the universe apart from hydrogen. It is widely accepted that He exists in the interiors of gas giant planets which holds the high-pressure conditions. Helium is extremely difficult to react with other elements to form compounds owing to its strong chemical inertness determined by the full-shell electronic structure. However, in recent years, several studies have shown that physical behavior of helium is not that simple under extremely high pressure, such as the predicted stable helium compound FeO_2He and the predicted water helium compound He-H_2O with anomalous atomic diffusion under high pressure. These results not only play a leading role in the discovery of new paradigm on chemical bonding, but also make a substantial step for the relevant researches in the fields of high-pressure physics, geoscience, and planetary science. This paper mainly introduces the progress on helium compounds at high pressure, focuses on discussing the physical mechanism of their stability, and provides prospects for future research on the design and discovery of new helium compounds under high pressure.

Keywords: crystal structure prediction; high pressure; inert helium compounds