高压物理学报

高压下Sr_2He化合物的晶体结构和物性

王清木 张盼 石景明 李印威

Crystal Structure and Physical Properties of Sr_2He Compound under High Pressure

WANG Qingmu, ZHANG Pan, SHI Jingming, LI Yinwei

引用本文:
王清木, 张盼, 石景明, 等. 高压下Sr_2He化合物的晶体结构和物性[J]. 高压物理学报, 2025, 39(0):000000. DOI: 10.11858/gywlxb.20251084
WANG Qingmu, ZHANG Pan, SHI Jingming, et al. Crystal Structure and Physical Properties of Sr_2He Compound under High Pressure[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2025, 39(0):000000. DOI: 10.11858/gywlxb.20251084

在线阅读 View online: https://doi.org/10.11858/gywlxb.20251084

DOI: 10.11858/gywlxb.20251084

高压下 Sr_2He 化合物的晶体结构和物性

王清木[1], 张 盼[2], 石景明[1], 李印威[1]

(1. 江苏师范大学物理与电子工程学院, 江苏 徐州 221116;
2. 新疆理工学院理学院, 新疆 阿克苏 843100)

摘要: 采用密度泛函理论框架下的第一性原理计算与 CALYPSO 晶体结构预测方法相结合, 系统探究了惰性元素氦(He)与碱土金属的化合物在高压条件下的结构稳定性。研究发现, 在碱土金属中, 锶(Sr)与 He 形成的化合物具有相对较低的能量。为此, 对 400 GPa 下 Sr_2He 的晶体结构进行了预测。电子定域函数和态密度分析表明, Sr 与 He 原子之间不存在形成共价键的趋势。此外, Bader 电荷分析显示, Sr 原子与 He 原子之间存在离子键作用, 电荷从 He 转移至 Sr, 从而为阐明 Sr_2He 的成键机制提供了关键见解。研究结果揭示了 Sr_2He 的晶体结构、成键性质及电子特性, 为理解此类亚稳材料的稳定性和物理性质提供了理论支撑, 并为其实验合成提供了重要指导。

关键词: 高压; 碱土金属; 氦; 第一性原理计算; CALYPSO; 结构预测

中图分类号: O521.2 **文献标志码:** A

惰性元素氦(He)的最外层具有满壳层电子结构, 常压下 He 的化学性质极其稳定, 很难与其他物质发生反应。He 的电子亲和能为零, 是宇宙中仅次于氢的第二丰富的元素, 在气态巨行星内部大量存在。1962 年, Bartlett[1] 首次合成了 $XePtF_6$ 惰性化合物, 打破了惰性元素不能反应的传统认知。这一发现激发了科研人员对惰性气体的研究兴趣。压力作为一种独特的调控手段, 可以有效缩短原子间的距离, 改变它们的成键性质, 形成非常规配比的稳定化合物[2−5]。例如: 2017 年, Dong 等[6] 采用模拟计算的方法, 首次发现了 113 GPa 下的 Na_2He 化合物, Bader 计算表明, 化合物中的 He 并未发生电子转移, 表明氦并不参与化学成键; 2018 年, Zhang 等[7] 预测了首个在地球内部稳定存在的 FeO_2He 化合物; 此外, 科研人员发现, 高压下 He 可以与惰性分子 NH_3[8−9]、H_2O[10−11]、CH_4[12] 形成稳定的化合物; 理论模拟工作还提出, He 在极高压力下会与 SiO_2、Fe、CO_2 发生反应形成化合物[13−17]。

碱金属元素(Na、K、Li)在高压环境下能够与惰性气体 Xe 发生化学反应[18−21], 形成稳定的化合物。相较于碱金属, 碱土金属元素的最外层电子数更多, 这种电子结构特征使其在高压下展现出更丰富的电子价态, 进而形成更多样化的晶体结构。这一特性使得碱土金属成为探寻新型稳定含 He 化合物的理想研究对象。此外, 碱土金属元素在地壳和地幔中的含量丰富, 而惰性气体 He 是地球内部物质迁移与演化的关键示踪剂, 研究两者在高压条件下的化学行为具有重要的科学意义。因此, 探索高压

* **收稿日期:** 2025-04-30; **修回日期:** 2025-06-23
基金项目: 新疆维吾尔自治区自然科学基金(2023D01C220); 国家自然科学基金(12474012, 12174160)
作者简介: 王清木(2004—), 男, 本科, 主要从事高压晶体结构设计和电子性质计算研究.
E-mail: 2950606012@qq.com
通信作者: 张 盼(1996—), 女, 硕士, 助教, 主要从事高压新型矿物的结构设计研究.
E-mail: 2022158@xjit.edu.cn
石景明(1987—), 男, 博士, 教授, 主要从事高压新型矿物的结构设计研究.
E-mail: jingmingshi@jsnu.edu.cn
李印威(1984—), 男, 博士, 教授, 主要从事高压新型矿物的结构设计研究.
E-mail: yinwei_li@jsnu.edu.cn

下碱土金属与 He 能否形成稳定化合物，解析其相互作用的物理机制，不仅有助于拓展高压化学的研究边界，也可为深入理解地球内部物质组成与演化提供重要的理论依据，是当前高压科学领域亟待攻克的关键科学问题。

本工作首先选取 Ba、Be、Cs、Mg、Rb、Sr 等碱土金属元素去替换 Na_2He 化合物中的 Na 元素，筛选出与 He 发生反应时形成能最低的碱土金属元素 Sr；随后，针对 Sr-He 体系中 Sr 与 He 的配比为 2∶1 的化合物，在高压条件下利用 CALYPSO 方法进行晶体结构预测，结合第一性原理计算，明确潜在的亚稳态新型化合物；通过分析声子色散关系，判断 Sr_2He 晶体结构的动力学稳定性，通过计算电子性质，探讨碱土金属 Sr 与惰性元素 He 的成键机制，以期为实验合成亚稳态 Sr-He 化合物提供新的理论基础。

1　计算方法

本工作主要采用基于密度泛函理论（density functional theory，DFT）的平面波赝势方法，利用 VASP 软件对掺杂后的碱土金属化合物进行优化[22–23]，使用 CALYPSO 晶体结构预测软件对 Sr_2He 化合物在 200～400 GPa 压力范围内进行结构预测[24–27]，采用广义梯度近似下的 Perdew-Burke-Ernzerhof 交换关联泛函[28]。在晶体结构预测中，分别选择 Sr 的 $4s^24p^65s^2$ 和 He 的 $1s^2$ 价电子构型，截断能设置为 600 eV，k 点网格密度为 $2\pi\times0.04$ Å^{-1}。Ba、Be、Mg、Cs 和 Rb 原子的电子价态分别为 $5s^25p^66s^2$、$2s^2$、$3s^2$、$5s^25p^66s^2$ 和 $4p^65s^1$。在精细优化过程中，截断能设置为 800 eV，k 点网格密度为 $2\pi\times0.02$ Å^{-1}，以确保体系中能量和力的收敛分别达到 1 meV/atom 和 1 meV/Å。采用 PHONOPY 中的超晶胞方法进行声子计算，使用 VESTA 软件绘制晶体结构和电子局域函数（electron localization function，ELF）图[29]。

2　结果与讨论

2.1　结构稳定性

Na_2He 晶胞的晶格常数 $a=b=c=3.95$ Å，空间群为 $Fm\bar{3}m$。该结构共包含 2 个 Na 原子、1 个 He 原子，其中 Na 原子占据 Wyckoff 位置 8c (0.25, 0.25, 0.25)，He 原子占据 4a (0, 0, 0)，晶体结构如图 1 所示。将该结构作为母体结构，选取碱土金属元素 Ba、Be、Cs、Mg、Rb 和 Sr 替换 Na_2He 中的 Na 原子。将替换完的晶体结构进行结构弛豫，计算结果如表 1 所示。从表 1 可以看出，除了 Sr 原子以外，其他几种碱土金属原子替换 Na 后均有较高的形成焓，表明 Sr 原子与 He 原子极有可能在高压条件下发生反应，形成稳定化合物。

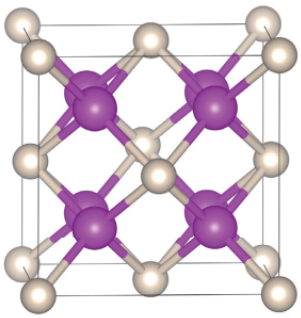

图 1　Na_2He 在 300 GPa 下的晶体结构（玫红色代表 Na 原子，灰色代表 He 原子）

Fig. 1　Crystal structure of Na_2He at 300 GPa (Rose red represents Na atoms and grey represents He atoms.)

表 1　Ba、Be、Cs、Mg、Rb 和 Sr 元素替换 Na 后的化合物在 200 和 300 GPa 压力下的形成焓

Table 1　Formation enthalpies of Ba, Be, Cs, Mg, Rb and Sr after Na replacement at 200 and 300 GPa

Compound	Formation enthalpy/(eV/atom)		Compound	Formation enthalpy/(eV/atom)	
	200 GPa	300 GPa		200 GPa	300 GPa
Na_2He	−0.185 692 765	−0.356 622 880	Mg_2He	4.745 655 837	4.857 751 318
Ba_2He	3.425 471 253	4.451 063 222	Rb_2He	2.225 320 695	3.149 201 765
Be_2He	9.452 763 723	10.218 131 800	Sr_2He	0.339 991 367	0.312 264 493
Cs_2He	3.940 463 840	5.399 894 545			

为深入理解 Sr-He 体系在高压下的物理化学行为，首先探索了其在高压下的结构稳定性。在 200、300 和 400 GPa 压力下对原子配比为 2∶1 的 Sr-He 化合物进行 CALYPSO 晶体结构预测，确定了能量最低的 Sr_2He，其空间群为 $R3m$。其形成焓的计算公式为

$$\Delta H(Sr_2He) = [H(Sr_2He) - 2H(Sr) - H(He)]/3 \quad (1)$$

式中：$\Delta H(Sr_2He)$ 为 Sr_2He 的形成焓，$H(Sr_2He)$ 为 Sr_2He 的焓，$H(Sr)$ 和 $H(He)$ 分别为 $P6_3/mmc$-Sr 和 hcp-He 单质的焓。

焓差图是探究晶体结构稳定性与相变过程的重要工具，能够直观展现不同晶体结构在热力学状态下的焓变关系。图 2(a) 所示的 Sr_2He 化合物焓差图清晰地呈现了形成焓随压力变化的趋势：随着压力从常压升高至 400 GPa，Sr_2He 的形成焓持续降低，在 400 GPa 压力下达到最低（ΔH=0.303 eV/atom）。这为实验合成提供了极具价值的热力学参考依据，有助于指导后续实验筛选更有效的合成条件。为了更好地说明压力对原子间距的有效作用，进一步给出了 Sr—He 键长（$d_{Sr\text{-}He}$）随压力变化关系，如图 2(b) 所示。结果表明，随着压力的升高，Sr—He 键长平滑减小，表明 Sr_2He 晶体结构在压力的作用下仍能保持其原始构型。Sr_2He 的晶体结构如图 2(c) 所示。该结构包含 4 个不相等的 Sr 原子（Sr1、Sr2、Sr3 和 Sr4）和 2 种 He 原子（He1 和 He2），形成空间群为 $R3m$ 的层状化合物，属于三方晶系。4 种 Sr 原子占据主要晶格位置，每 4 层 Sr 原子之间插入一层 He 原子。Sr-He 原子之间的最短距离为 1.97 Å，Sr-Sr 和 He-He 原子之间的最短距离分别为 2.37 和 1.39 Å，详细的结构信息如表 2 所示，其中：α、β、γ 为晶格常数。表 2 为理解其晶体结构随压力的演变规律提供了定量依据。

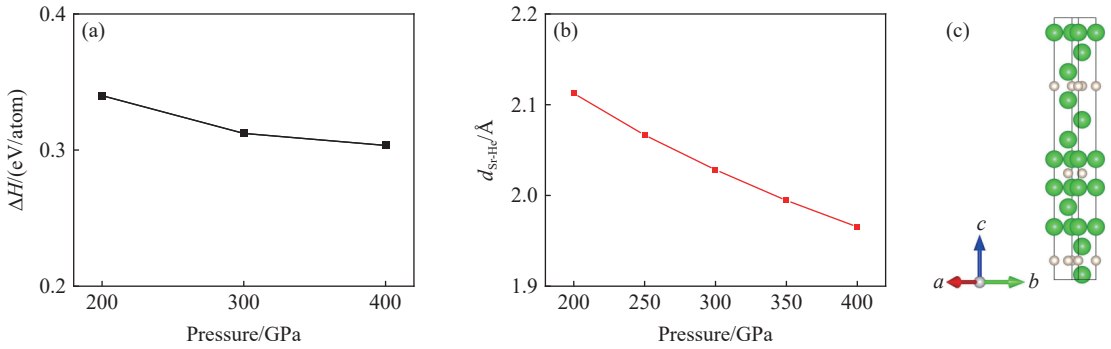

图 2　(a) $R3m$-Sr_2He 在 200、300 和 400 GPa 下的形成焓，(b) Sr-He 原子间距随压力的变化，(c) Sr_2He 在 400 GPa 下的晶体结构（绿色和灰色分别代表 Sr 原子和 He 原子）

Fig. 2　(a) Formation enthalpy of $R3m$-Sr_2He at 200, 300, and 400 GPa; (b) evolution of Sr-He bond distance as a function of pressure; (c) crystal structure of Sr_2He at 400 GPa, where green and gray spheres represent Sr and He atoms, respectively

表 2　400 GPa 下 Sr_2He 化合物的晶体结构参数

Table 2　Crystal structure parameters of Sr_2He compound at 400 GPa

Space group	Lattice parameters	Wyckoff position
$R3m$	a=2.408 80 Å b=2.408 80 Å c=25.815 0 Å α=β=90° γ=120°	Sr1: 3a (0.000 00, −0.000 00, 0.768 18) Sr2: 3a (0.000 00, −0.000 00, 0.359 84) Sr3: 3a (0.000 00, −0.000 00, 0.251 93) Sr4: 3a (0.000 00, −0.000 00, 0.510 49) He1: 3a (0.000 00, −0.000 00, 0.972 81) He2: 3a (0.000 00, −0.000 00, 0.639 03)

声子色散关系可以提供关于晶体结构动力学稳定性的信息，是判断晶体结构能否稳定存在的重要依据。声子谱中存在虚频（负的频率）表明晶体结构处于亚稳态或不稳定状态。为了验证 $R3m$-Sr_2He 化

合物的动力学稳定性，计算并绘制了 400 GPa 下其声子色散关系，如图 3 所示。结果显示，声子色散关系图中不存在虚频，表明该化合物具有动力学稳定性。

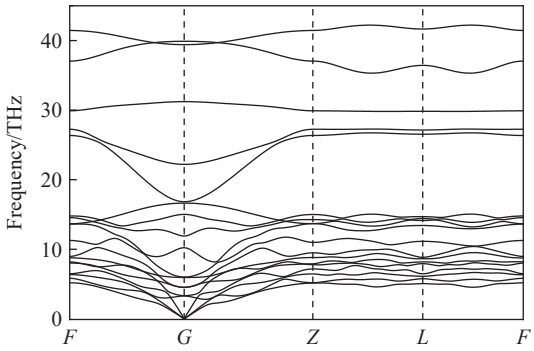

图 3　$R3m$-Sr_2He 在 400 GPa 下的声子色散关系

Fig. 3　Phonon dispersion of $R3m$-Sr_2He at 400 GPa

2.2　Sr_2He 化合物的电子性质

电子能带结构和态密度（density of states，DOS）可以用于揭示结构的电子性质。高压下 $R3m$-Sr_2He 晶体的电子能带结构计算结果如图 4 所示。从图 4 可以看出，$R3m$-Sr_2He 的导带与价带跨越费米面发生交叠，因而 $R3m$-Sr_2He 是一个能隙（E_g）为 0 eV 的金属结构。在费米能级（E=0 eV）附近，电子能带呈现出复杂的起伏形态，反映了电子在晶体周期性势场中的能量变化情况。进一步计算了 400 GPa 下 $R3m$-Sr_2He 的总态密度和分波态密度，如图 5 所示，其中，虚线所处位置为费米能级。在费米能级处，总态密度明显大于零，表明 Sr_2He 结构具有金属性质，与能带结构计算结果一致。态密度计算结果显示：在费米能级附近，Sr-s 的态密度相对较低且波动较小，说明 Sr 原子的 s 轨道电子在费米能级附近对总态密度的贡献有限；Sr-p 的态密度在费米能级附近有一定起伏，相较于 Sr-s 的态密度有更明显的波动，表明 Sr 原子的 p 轨道电子在化学键合或电子转移过程中有一定贡献；Sr-d 的态密度在费米能级附近呈现出较为显著的波动和峰值，说明 Sr 原子的 d 轨道电子在费米能级附近对总态密度的贡献较大，表明这些电子对形成 $R3m$-Sr_2He 起着至关重要的作用；在费米能级附近，He-s 和 He-p 的态密度极低，趋于零，表明 He 原子的 s 和 p 轨道电子在费米能级附近对总态密度几乎无贡献，与 He 原子本身的电子结构稳定、不易参与电子转移等特性相符。这与先前 He 原子插入 Na 单质中打开了一个较宽的带隙[6] 有所不同。通过分波态密度可以看出，Sr 原子与 He 原子之间不存在明显的杂化，表明 Sr 原子与 He 原子之间的相互作用较弱，可能不存在成键行为。

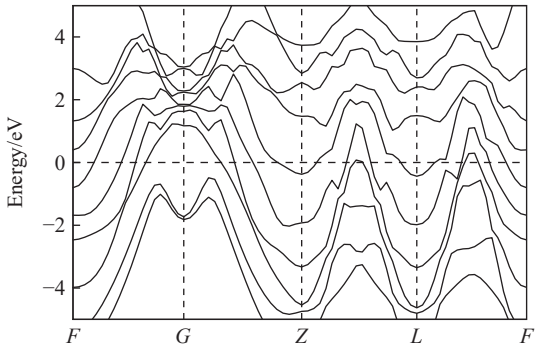

图 4　Sr_2He 化合物在 400 GPa 下的电子能带

Fig. 4　Electronic band structure of Sr_2He at 400 GPa

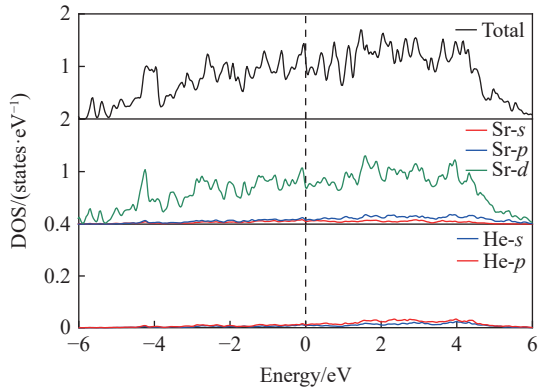

图 5　Sr_2He 化合物在 400 GPa 下的态密度分布

Fig. 5　Density of states of Sr_2He at 400 GPa

为了直观反映 Sr_2He 化合物中的电子分布状态，用 ELF 表征电子的局域化程度：ELF 为 1 表示电子高度局域化，存在强共价键；ELF 为零则对应空间中局域化概率较低的区域；ELF 为 0.5 表示电子类气体行为的区域。如图 6 所示，$R3m$-Sr_2He 中 Sr 原子周围的 ELF 约为 0.5，He 原子周围的 ELF 约为零，He 原子周围高度局域化的电子聚集只围绕在其周边，表明 Sr 与 He 之间不具备形成共价键的特征。

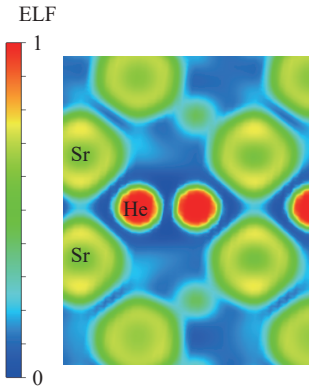

图 6　Sr_2He 在 400 GPa 下的电子局域函数

Fig. 6　Electron localization function of Sr_2He at 400 GPa

为了进一步探索电子分布，确定成键性质，对 $R3m$-Sr_2He 的 Bader 进行了计算分析，结果如表 3 所示，其中 e 为元电荷。

在 200 GPa 时，Sr_2He 中的 Sr1、He1 和 He2 原子分别得到−0.034、−0.104 和−0.091 个电子，Sr2、Sr3 和 Sr4 分别失去 0.123、0.100 和 0.006 个电子。随着压力升高到 400 GPa，Sr_2He 中的 Sr1、Sr4、He1 和 He2 原子分别得到−0.027、−0.013、−0.091 和−0.083 个电子，Sr2 和 Sr3 原子得到 0.102 和 0.113 个电子。Sr_2He 中 He 原子的电荷转移与 NH_3-He、H_2O-He、MgF-He、MgO-He、FeO_2He 中的电子转移情况[6–11, 30]类似（−0.002～0.1 个电子），表明 $R3m$-Sr_2He 具有离子性质。随着压力进一步升高，Sr 原子向 He 原子转移的电荷数几乎不变，且未在 Sr 与 He 之间聚集间隙电子，与 Mg-He、Na-He、Mg-Xe 之间的成键有明显的不同，相同的是，这些元素与 He 之间的化学相互作用都起到了一定降低内能的效果，He 原子可以作为库仑屏蔽在高压下形成稳定或亚稳定化合物[6, 30–32]。

表 3　$R3m$-Sr_2He 在 200～400 GPa 下的电荷转移

Table 3　Bader charge transfer values of $R3m$-Sr_2He under pressures of 200–400 GPa

Phase	Pressure/GPa	Atom	Charge/e
Sr_2He	200	Sr1	0.034 740
		Sr2	−0.123 743
		Sr3	−0.100 587
		Sr4	−0.006 534
		He1	0.104 386
		He2	0.091 738
Sr_2He	300	Sr1	0.030 874
		Sr2	−0.115 756
		Sr3	−0.103 687
		Sr4	0.005 565
		He1	0.097 306
		He2	0.085 698
Sr_2He	400	Sr1	0.027 394
		Sr2	−0.102 514
		Sr3	−0.113 609
		Sr4	0.013 318
		He1	0.091 454
		He2	0.083 956

晶体轨道哈密顿布居（crystal orbital Hamiltonian population, COHP）和集成晶体轨道哈密顿布居（integrated crystal orbital Hamiltonian population, ICOHP）可用于深入了解轨道对晶体结构的贡献。负的 COHP 代表成键状态；相反，正的 COHP 代表反键状态。化学键的结合强度可以用 ICOHP 来测量，特别是比较系统中不同的元素时。为了进一步确定 Sr 原子与 He 原子之间的相互作用，计算了 $R3m$-Sr_2He 的 COHP 曲线，如图 7 所示。最近的 Sr-He 键的 COHP 在费米能级附近的 ICOHP 约为−0.002 5 eV，意味着 Sr_2He 中最近的 Sr 原子与 He 原子之间没有成键。此外，Sr_2He 中费米能级上占据反键态的电子也有助于形成导带，从而促进化合物金属化。这一结果与图 4 和图 5 中描述的能带结构和态密度结果一致。

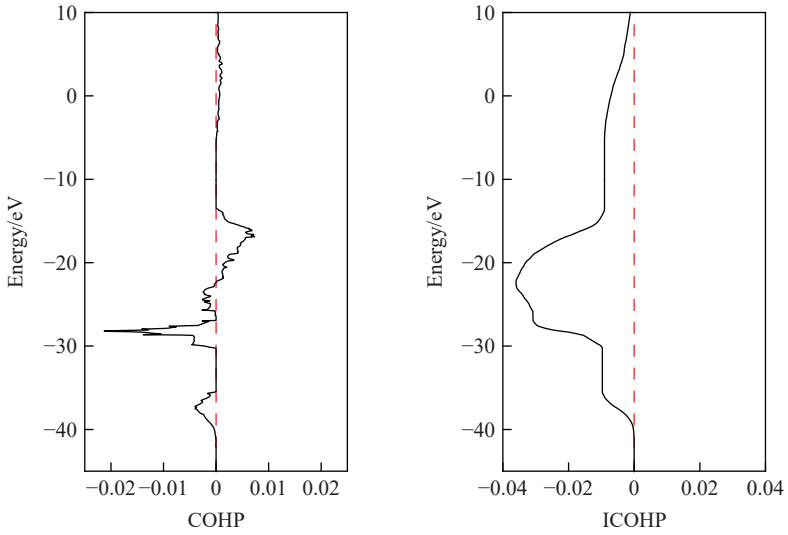

图 7　Sr-He 之间的 COHP 和 ICOHP

Fig. 7　COHP and ICOHP curves between Sr and He

3　结　论

采用 CALYPSO 晶体结构预测方法，结合第一性原理计算，系统研究了碱土金属替换 Na_2He 化合物中 Na 原子后的结构演变与物理性质。计算结果显示，在 400 GPa 高压条件下，Sr_2He 呈现出最低形成焓（ΔH=0.303 eV/atom），对应 $R3m$ 空间群结构，是潜在的可合成的亚稳态结构。通过稳定性与电子性质分析，证实 Sr_2He 在 400 GPa 下具备动力学稳定性，电子能带结构在费米面附近的导带与价带交叠，呈现出金属特性。ELF 分析表明，Sr 与 He 原子间不存在传统共价键。Bader 电荷转移计算进一步揭示，Sr 原子与 He 原子之间存在电荷转移，表示 Sr 与 He 之间形成弱的离子键。值得注意的是，ICOHP 计算结果表明，费米能级上占据反键态的电子对导带形成具有促进作用，加速了化合物的金属化进程。本工作所提出的 Sr_2He 亚稳态结构为实验合成新型含氦化合物指明了方向，有望推动高压材料合成技术的创新，为超导材料、极端环境探测材料的研发提供潜在候选体系。

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] XU M L, LI Y W, MA Y M. Materials by design at high pressures [J]. Chemical Science, 2022, 13(2): 329–344.

[6] 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.
[7] 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.
[8] 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.
[9] 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.
[10] LIU C, GAO H, WANG Y, et al. Multiple superionic states in helium-water compounds [J]. Nature Physics, 2019, 15(10): 1065–1070.
[11] 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.
[12] 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.
[13] 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.
[14] 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.
[15] SATO T, FUNAMORI N, YAGI T. Helium penetrates into silica glass and reduces its compressibility [J]. Nature Communications, 2011, 2: 345.
[16] 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.
[17] MONSERRAT B, MARTINEZ-CANALES M, NEEDS R J, et al. Helium-iron compounds at terapascal pressures [J]. Physical Review Letters, 2018, 121(1): 015301.
[18] TIAN Y F, TSE J S, LIU G T, et al. Predicted crystal structures of xenon and alkali metals under high pressures [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2022, 24(30): 18119–18123.
[19] ZOU M, YANG K, ZHANG P, et al. Existence of solid Na-Xe compounds at the extreme conditions of Earth's interior [J]. Physical Review Research, 2023, 5(4): 043107.
[20] LU C W, YANG K, CUI W W, et al. Stability of XeK_4 compound under extreme conditions [J]. Physical Review B, 2024, 110(2): 024111.
[21] LIU Z, BOTANA J, MIAO M S, et al. Unexpected Xe anions in $XeLi_n$ intermetallic compounds [J]. Europhysics Letters, 2017, 117(2): 26002.
[22] KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. Physical Review B, 1996, 54(16): 11169–11186.
[23] VANDERLEI DOS SANTOS A, PADILHA G, MONÇALVES M. Determination of the stability and magnetic properties of Fe-Pd nitride using the generalised gradient approximation (GGA) [J]. Solid State Sciences, 2012, 14(2): 269–275.
[24] WANG Y C, LV J, ZHU L, et al. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization [J]. Physical Review B, 2010, 82(9): 094116.
[25] 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.
[26] GAO B, GAO P Y, LU S H, et al. Interface structure prediction via CALYPSO method [J]. Science Bulletin, 2019, 64(5): 301–309.
[27] 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.
[28] BLÖCHL P E, JEPSEN O, ANDERSEN O K. Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations [J]. Physical Review B, 1994, 49(23): 16223–16233.
[29] MOMMA K, IZUMI F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data [J]. Journal of Applied Crystallography, 2011, 44(6): 1272–1276.
[30] LIU Z, BOTANA J, HERMANN A, et al. Reactivity of He with ionic compounds under high pressure [J]. Nature Communi-

cations, 2018, 9(1): 951.

［31］HUANG Y S, SONG H X, HAO Q D, et al. He-Mg compounds and helium-driven nonmetal transition in metallic magnesium [J]. Physical Review B, 2024, 110(21): 214102.

［32］TANG H Y, LIU J Y, SHA Y X, et al. Pressures-stabilized unconventional stoichiometric electride Mg_3S_2 [J]. Physical Review B, 2025, 111(18): 184104.

Crystal Structure and Physical Properties of Sr_2He Compound under High Pressure

WANG Qingmu[1], ZHANG Pan[2], SHI Jingming[1], LI Yinwei[1]

（1. *School of Physics and Electronic Engineering*, *Jiangsu Normal University*, *Xuzhou* 221116, *Jiangsu*, *China*;
2. *School of Sciences*, *Xinjiang Institute of Technology*, *Aksu* 843100, *Xinjiang*, *China*）

Abstract: By combining first-principles calculations under the framework of density functional theory (DFT) and the CALYPSO crystal structure prediction method, the structural stability of the inert element helium (He) and alkaline-earth metals under high-pressure conditions has been systematically investigated. The calculations reveal that among the alkaline-earth metals, strontium (Sr) forms compounds with He exhibiting relatively low energy values. Consequently, the crystal structure of Sr_2He at 400 GPa was predicted. Electron localization function (ELF) and density of states (DOS) analyses show no tendency for covalent bond formation between Sr and He atoms. Furthermore, Bader charge analysis reveals ionic bonding between Sr and He atoms, with charge transfer occurring from He to Sr. These results provide key insights into the bonding mechanism of Sr_2He. This study elucidates the crystal structure, bonding nature, and electronic properties of Sr_2He, offering theoretical support for understanding the stability and physical properties of such metastable materials and providing important guidance for their experimental synthesis.

Keywords: high pressure; alkali-earth metals; He; first-principles calculation; CALYPSO; structure prediction