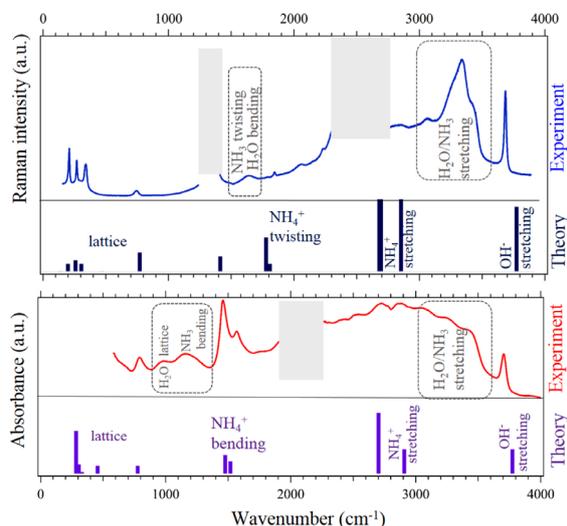


## Ionisation des glaces sous les pressions des planètes géantes

*L'eau et l'ammoniac sont des molécules simples très abondantes dans l'Univers. En particulier, ces composés seraient, avec le méthane, les constituants majoritaires des couches internes des planètes géantes glacées (Uranus, Neptune), de satellites (Titan, Ganymède) et d'exoplanètes telles que GJ 436b or HAT-P-11b, dans lesquelles ils sont soumis à des conditions extrêmes de pression et de température. On soupçonne que les champs magnétiques inhabituels de Neptune et Uranus observés par la sonde Voyager II sont liés à l'ionisation de ces molécules sous haute pression et température. Des recherches précédentes ont montré que, dans les glaces d'eau et d'ammoniac pures, la pression et la température favorisent la création d'ions à des pressions très élevées, de l'ordre du Mbar (1 Mbar = 100 GPa soit 1 million de fois la pression atmosphérique), mais jusqu'à présent, la présence d'espèces ioniques dans les mélanges de glaces, plus pertinents pour décrire les intérieurs planétaires, n'avait jamais été démontrée.*

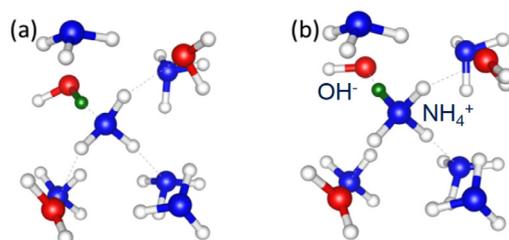
*En combinant des expériences en laboratoire (spectroscopies Raman/infra-rouge) et sur grands instruments (diffraction des rayons X (ESRF) et des neutrons (ISIS), spectroscopie Infrarouge (SOLEIL)), des chercheurs de l'équipe PHYSIX de l'IMPMC ont montré que la compression d'un mélange solide à proportions égales d'eau et d'ammoniac favorise aussi son ionisation, grâce au transfert de proton (H+) entre l'eau et l'ammoniac.*

Ce phénomène se produit dans le mélange à des pressions plus de 10 fois plus faibles que dans les corps purs. Contrairement aux attentes, cette ionisation n'est pas complète car le nouveau composé synthétisé au-delà de 7 GPa contient à la fois des ions (OH<sup>-</sup>, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>) et des molécules (H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub>) (voir figures 1 et 2). Grâce à des calculs de dynamique moléculaire *ab initio*, les chercheurs ont montré que si l'ionisation n'est que partielle, c'est parce qu'elle est frustrée par le désordre très important qui caractérise ce cristal, que l'on peut décrire comme un alliage ionico-moléculaire. Ce composé, le premier exemple du genre dans un système si simple, reste stable sur un grand domaine de pression à température ambiante, mais redevient purement moléculaire lorsqu'il est décomprimé en-dessous de 7 GPa.



**Figure 1**

Spectres Raman (à 10 GPa) et d'absorbance (à 12 GPa) du monohydrate d'ammoniac. Les spectres expérimentaux (lignes pleines) à 300 K sont comparés aux spectres simulés de la phase purement ionique prédite (P4/nmm) à 0 K. Les parties grisées dans le spectre Raman masquent les signaux Raman du 1<sup>er</sup> et 2<sup>nd</sup> ordre des enclumes de diamant utilisées pour atteindre les hautes pressions. De même, la partie grisée dans le spectre d'absorbance masque l'absorption due aux diamants.



**Figure 2**

Représentations des configurations moléculaires issues des calculs ab initio à 10 GPa et montrant (a) le transfert d'un proton (en vert) d'une molécule d'eau vers une molécule d'ammoniac et conduisant (b) à la formation d'une paire d'ions (NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, OH<sup>-</sup>) coexistant avec des molécules d'eau et d'ammoniac.

La prochaine étape sera d'étudier l'effet des hautes températures pour voir si un solide dit « superionique », caractérisé par une diffusion des protons et donc une conductivité ionique très élevée, peut être obtenu dans des conditions de pression et de température beaucoup plus douces que celles observées dans les glaces pures et d'en étudier les conséquences sur les modèles planétaires.

Ce travail est une collaboration entre l'équipe PHYSIX de l'IMPMC (Sorbonne Université, CNRS, MNHN, IRD), les plateformes de diffraction et de spectroscopies de Sorbonne Université, des chercheurs des synchrotrons SOLEIL et ESRF, des chercheurs de l'université d'Edimbourg (UK) et de l'Institut des NanoSciences de Paris. Ce travail a bénéficié des soutiens financiers du LabEX MATISSE et de l'ANR SUPER-ICES.

### Référence

« Topologically frustrated ionisation in a water-ammonia ice mixture »  
 C. Liu, A. Mafety, J.A. Queyroux, C. W. Wilson, H. Zhang, K. Béneut, G. Le Marchand, B. Baptiste, P. Dumas, G. Garbarino, F. Finocchi, J.S. Loveday, F. Pietrucci, A.M. Saitta, F. Datchi and S. Ninet  
*Nature Communications*, 8, 1065 (2017)  
 doi:10.1038/s41467-017-01132-z

### Contact

Sandra Ninet : sandra.ninet@upmc.fr