

[点击搜索](#)[高级搜索](#)

## 《美国科学院院刊》(PNAS)报道量子中心王恩哥和徐莉梅研究成果

日期: 2012-08-20 信息来源: 物理学院

冰是自然界中最广泛存在也是最为人们熟知的物质之一。冰对人类生存乃至整个自然界变化都有重要影响,因此对其本质的研究一直吸引着科学家们的广泛兴趣。尽管上百年来科学界对冰的各种形态及其相变规律做了大量研究,但对冰表面结构及其相应物理化学性质的了解长期以来仍是一个空白。

近几年来,王恩哥教授课题组在冰表面研究中取得了一系列重要突破。2008年,他们首次发现并提出了冰表面序参量的概念。由于人们看到的冰是在表面开始融化的,一般会认为冰的表面相对体内会更无序,也就是“热”一些。但他们的研究得到了一个令人惊讶的结果:冰的表面在融化前会比体内更有序,也就是更“冷”,而且冰的(0001)表面在任何温度下都不会发生有序—无序相变(Phys. Rev. Lett. 101, 155703 (2008))。

2011年,他们进一步研究并证明冰表面分子空位形成能随序参量的变化分布的非常宽。例如,在冰的同一表面上,某些分子空位形成能可以仅是其它空位的1/3,大概只有0.1~0.2 eV。理想晶态冰表面上的空位形成能范围甚至同无定形冰相当。这个结论表明冰表面上的空位数比之前人们估计的要多得多,从而使冰晶颗粒在物理化学反应中比原来预计的要更加活泼。导致这一反常现象的根本原因是由于冰表面有效电荷所引起的局域电场,它直接影响着表面层水分子的电偶极矩,进而对不同的表面位置可以给出非常不同的空位形成能。这项研究工作对了解冰表面的预溶化过程至关重要(NATURE Material 10, 794 (2011))。

最近,量子中心王恩哥教授、徐莉梅副教授与他们的研究生孙兆茹和潘鼎一起在冰表面吸附方面的研究中取得了新的进展。他们首先证明冰表面的吸附不仅仅取决于冰表面最近邻OH悬挂键,也与整个冰表面悬挂的OH键相关。这是因为冰表面悬挂键产生的电场是长程的,因此只考虑最近邻OH悬挂键对吸附分子的影响不能准确地描述冰表面的吸附特性。他们还发现冰表面的吸附能与序参量之间有一个正比关系,这预示着分子吸附更容易发生在序参量大的冰表面。这项工作不但有助于解释直接影响地球环境变化的云层中颗粒物吸附问题,还从微观尺度上揭示了冰的生长过程。

这项工作近期发表在《美国科学院院刊》(PNAS)上,已经引起了国内外专家的广泛关注。王恩哥教授也应邀在2012年美国化学年会(ACS)和2012年国际计算物理年会(CCP)上做大会邀请报告。

编辑: 剡溪

[\[打印页面\]](#) [\[关闭页面\]](#)

转载本网文章请注明出处

[友情链接](#)[合作伙伴](#)[我为党代会建言献策](#)[学生资助](#)[学雷锋在行动](#)[医学部 新闻网](#)[北大招生网 www.gaozkpku.cn](#)[北大学生就业信息网](#)[本网介绍](#) | [设为首页](#) | [加入收藏](#) | [校内电话](#) | [诚聘英才](#) | [新闻投稿](#)

投稿邮箱 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