

化学化工学院李剑锋、程俊教授合作成果发表在Nature Materials

发布时间：2019-05-05 浏览次数：1570

化学化工学院李剑锋、程俊教授课题组在固液界面上研究水分子的构型方面取得重大突破。相关研究成果“*In situ* probing electrified interfacial water structures at atomically flat surfaces”在线发表于Nature子刊《自然-材料》(Nature Materials, DOI: 10.1038/s41563-019-0356-x)。



In situ probing electrified interfacial water structures at atomically flat surfaces

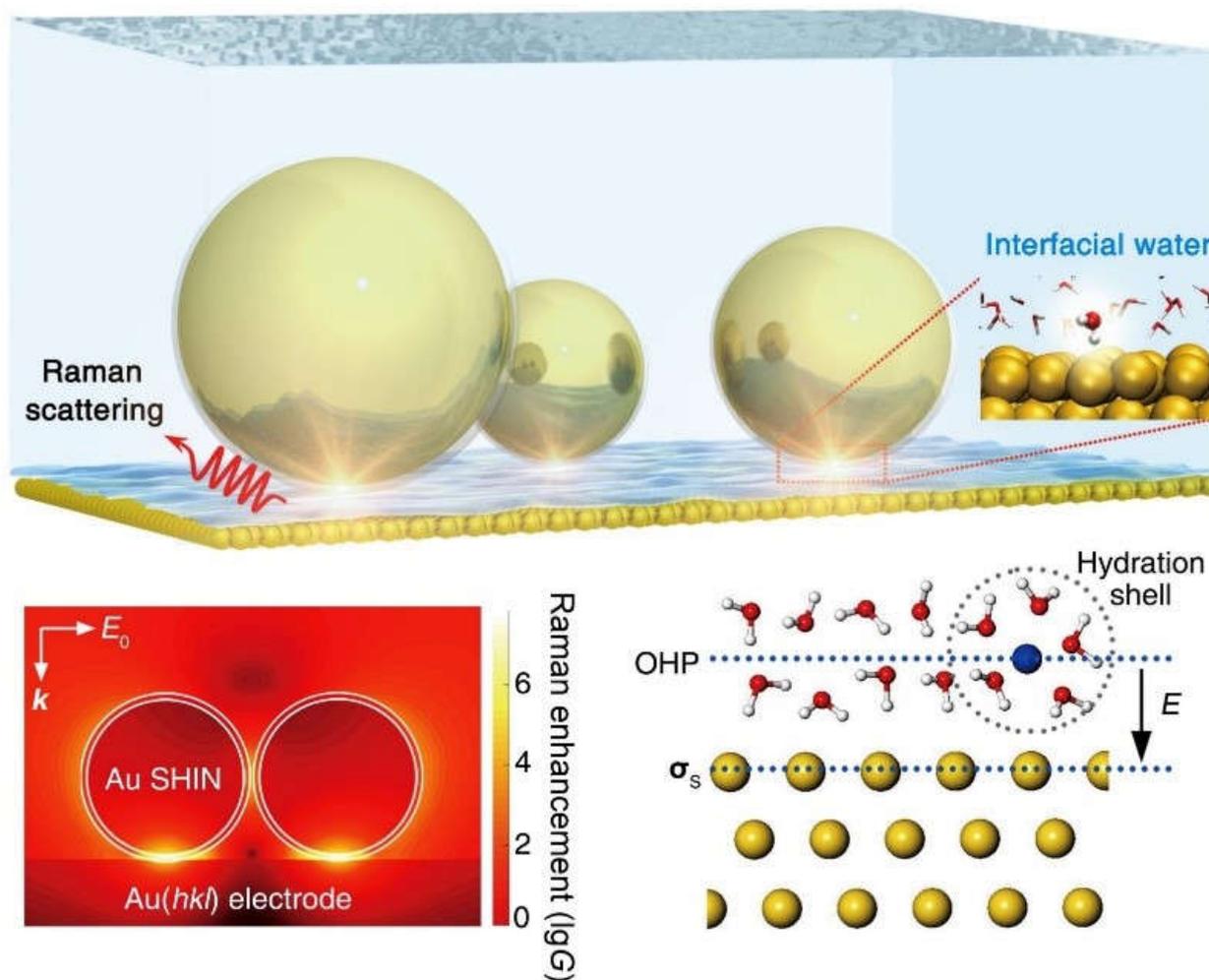
Chao-Yu Li^{1,3}, Jia-Bo Le^{1,3}, Yao-Hui Wang¹, Shu Chen², Zhi-Lin Yang², Jian-Feng Li^{1,2*}, Jun Cheng^{1*} and Zhong-Qun Tian¹

Solid/liquid interfaces are ubiquitous in nature and knowledge of their atomic-level structure is essential in elucidating many phenomena in chemistry, physics, materials science and Earth science¹. In electrochemistry, in particular, the detailed structure of interfacial water, such as the orientation and hydrogen-bonding network in electric double layers under bias potentials, has a significant impact on the electrochemical performances of electrode materials²⁻⁴. To elucidate the structure of electric double layers at electrochemical inter-

of interfacial water have been proposed based on vibrational spectroscopic measurements, partly because of the ambiguity in interpreting the spectra^{12,16,17}. So far, tetrahedrally coordinated water^{18,19}, trihedrally coordinated water^{14,19}, surface specifically adsorbed water¹⁴, hydrophobic water¹⁷ and so on have been reported at metal/water interfaces using various vibrational spectroscopy techniques. However, a clear picture of how these types of interfacial water change in response to the applied potential is still missing^{14,17,20}.

Here, aiming to unravel the structure of interfacial water in

自然界中水无处不在，人们对水分子的研究已经长达一个多世纪。特别是在材料表面，从原子结构层面理解界面水所发生的各种物理和化学过程，将有利于指导能源和环境领域中开发更好的技术和器件。特别是在电化学中，界面水的详细结构，比如其在双电层中的取向以及复杂的氢键网络，对电极材料的电化学性能具有显著影响。文献中采用振动光谱已经推知了水在金属界面的不同构型，如四配位水、三配位水、表面特性吸附水、自由水等。然而，仍然缺乏这些界面水在不同电位下清晰的构型图像。在原子级平整的单晶表面进行光谱检测，将有助于揭示界面反应的机理和构型相关的活性，对电化学能源界面的研究具有重要意义。李剑锋教授课题组采用不受体相水干扰的表面增强拉曼光谱，首次在金(111)和(100)单晶电极表面上获得了界面水的拉曼信号，并且在析氢反应过程中原位观测到了界面水的两种构型转变。发现界面水随着电位的负移，由“平行”结构向“单端氢朝下”，再向“双端氢朝下”变化。程俊教授课题组采用从头算分子动力学理论方法，模拟出不同电位下，在双电层中界面水的三种构型以及相应的氢键数目，与实验数据很好地吻合，进一步揭示了双电层的原子级结构。该研究首次在实验和理论层面，将界面水的构型转变以及氢键断裂与精确的电极电势标尺进行关联，对探知双电层的三维结构具有指导性意义。



该研究工作通过厦门大学校内合作完成，化学化工学院李剑锋教授和程俊教授为通讯作者，田中群教授提供了重要指导。李超禹博士（现美国麻省理工学院博士后）和乐家波博士（现能源材料化学协同创新中心博士后）为共同第一作者，王耀辉博士生在实验上提供了帮助，物理系的陈舒博士和杨志林教授为本工作开展了电磁场增强计算。

该工作得到国家自然科学基金委的大力资助，也得到了固体表面物理化学国家重点实验室、谱学分析与仪器教育部重点实验室、能源材料化学协同创新中心的支持。

论文链接：<https://www.nature.com/articles/s41563-019-0356-x>

（化学化工学院）

责任编辑：黄伟林