

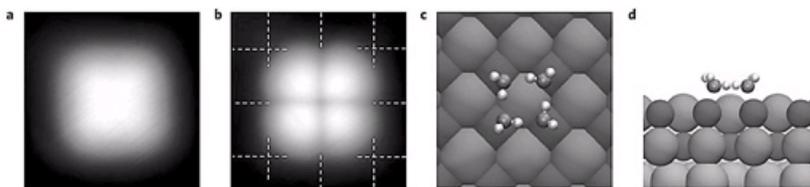
## 我国科学家拍摄到水分子内部结构

通过解析粉尘表面水结构，有望为解决PM2.5危害提供新思路

文章来源：人民日报 赵婀娜

发布时间：2014-01-16

【字号：小 中 大】



图a—d为水团簇在盐表面上的氢键构型（图a、b为显微镜下的图像，图c、d为不同视角的理论模拟结构图）。

北京大学量子材料中心供图

水是人们日常生活中最常见的物质。但有关“水”的奥秘，人类还有很多问题没有解开。比如说，我们从初中课本上就知道，它是由两个氢原子和一个氧原子构成的，但水分子到底长什么样？它们又是如何形成水分子的？水是生命之源，其独特的氢键结构也一直让科学家难以解释。这些一直都是未解之谜。

日前，我国科学家——北京大学量子材料中心、量子物质科学协同创新中心的江颖课题组和王恩哥课题组共同在水科学领域取得重大突破，首次拍摄到了水分子的内部结构，使得在实验中直接解析水的氢键网络构型成为可能。这一科研成果已于1月5日以全文的形式在世界权威科学杂志《自然—材料学》上在线发表。江颖和王恩哥是文章的共同通讯作者，博士研究生郭静、孟祥志和陈基是文章的第一作者，物理学院的李新征研究员和量子材料中心的施均仁教授在理论方面提供了重要的支持和帮助。这项工作得到了国家基金委、科技部、教育部和北京大学的资助。

给水分子拍照不是一件容易的事儿

给水分子拍照不是一件容易的事，因为它实在是太小了，直径只有一根头发丝的百万分之一，而且在液态情况下，水分子运动非常快。拍照的第一个难题，就是给它选择一个合适的衬底。

由于拍摄仪器的要求，这个衬底还得能导电才行。以前，科学家一般选取的是以金属作为衬底，把水直接放在金属上进行观察，但由于水分子和金属之间有很强的相互作用，水分子的轨道往往会被金属的电子态所淹没，所以此前世界各国的科学家拍到的水分子照片，最多只是模糊的外形——“一个没有任何内部结构的圆形凸起”。这次我国科学家选取了金属表面生长的绝缘薄膜（氯化钠）作为拍摄的衬底，让水分子吸附在盐的表面进行观察，这大大减小了水分子和衬底之间的耦合，从而使水分子本征的轨道结构得以保留。

拍摄水分子内部结构的另外一个挑战，就是单个水分子的信号强度异常微弱，对实验仪器的精度要求非常高。记者了解到，过去3年，江颖课题组主要致力于超高分辨的扫描探针显微镜系统的研制和开发，在单分子成像和操控方面积累了丰富的经验，并取得了一系列的研究进展：在亚纳米尺度对二维自旋晶格的近藤效应进行了实空间成像；探测到了单个萘酞菁分子内部不同的振动模式的空间分布；对单个功能化分子内部的化学键实现了选择性操纵。在此基础上，江颖课题组和王恩哥课题组紧密合作，通过仔细的论证和不懈的探索，成功地把亚分子级分辨成像和操控技术应用到水科学领域，开创性地把扫描隧道显微镜的针尖作为顶栅极，以皮米（1皮米相当于一米的一万亿分之一）的精度控制针尖与水分子之间的距离和耦合强度，调控水分子的轨道态密度在费米能级附近的分布，从而大大提高了成像的信噪比，使得研究人员捕捉到水分子更清晰的面貌。基于高分辨率的水分子图像，研究人员还可以进一步确定水分子在表面上的取向。

利用和改变水的特性将成为可能

普普通通的一滴水中，就有无数个水分子。那么，这些水分子是怎么凑在一起，变成我们看得见摸得着的水呢？我国科学家给水分子拍照的时候，在这一点上也有重要的发现。此前，科学家们已经知道，水分子和水分子之间是由氢键相连的，氢键的构型和方向性决定了水的很多特性。如何在微观上确定水的氢键网络构型是水科学领域的关键科学问题之一。如果能拍摄到水分子的内部结构和空间取向，将使得在实验中直接解析水的氢键网络构型成为可能，这是很多实验科学家梦寐以求的事情。我国科学家不仅拍摄到单个水分子的结构，还拍到了由4个水分子组成的水团簇，通过高分辨率的轨道图像首次成功解析出了水团簇的微观氢键构型，并且发现，水分子之间通过氢键连接的时候，还存在着一定的方向性。结合第一性原理计算，研究人员发现以往报道的盐表面的水分子团簇都不是最稳定的构型，并提出了一种全新的四聚体吸附结构。

水分子内部结构长什么样，水分子和水分子之间如何连接，它们在不同的固体表面，又有怎样不同的变化，我国科学家开展的这些研究，都有助于人们利用和改变水的特性，在现实生活中有广泛的应用。

课题组相关负责人介绍：比如说大家现在比较关注的PM2.5，本质上它是一个微米（1微米相当于1米的一百万分之一）级的粉尘，作为大气中一种重要的凝结核，外表面通常会包裹着一层水。利用上述研究工作中所发展的水分子高分辨率成像技术，如果能够把不同类型粉尘表面的这一层水的微观结构解析出来的话，将有可能给环境科学家们一些启发和帮助，让他们能够对症下药，针对性地采取一些化学或物理的办法，增强粉尘外面水蒸气的凝结，或者促进粉尘之间的相互聚合，从而使得PM2.5粉尘能够直接沉降到地面。

打印本页

关闭本页