

点击搜索

高级搜索

《自然-材料》发表量子材料中心江颖等在水科学领域的重要研究进展

日期：2014-01-05 信息来源：量子材料中心

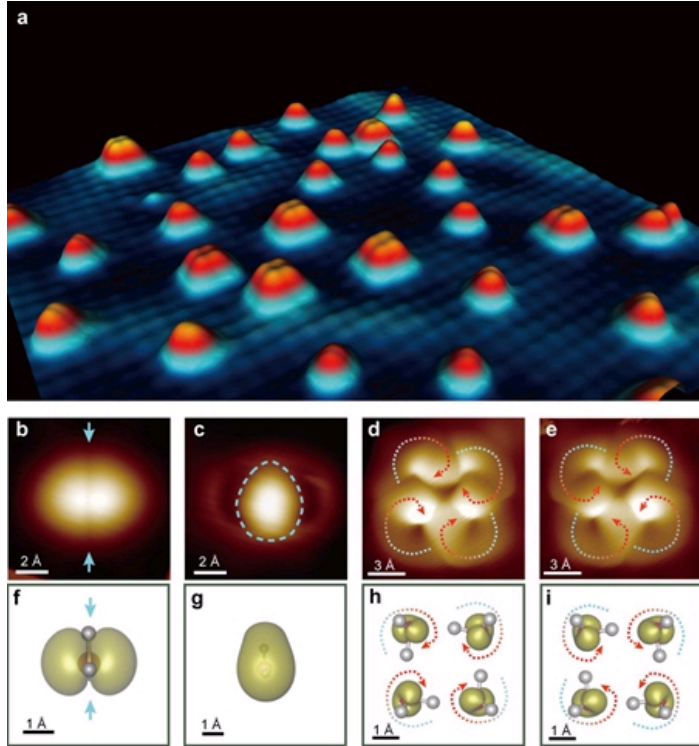
北京大学量子材料中心、量子物质科学协同创新中心江颖课题组与王恩哥课题组合作，在水科学领域取得重大突破，在国际上首次实现了水分子的亚分子级分辨成像，使在实空间中直接解析水的氢键网络构型成为可能。相关研究成果于1月5日以Article的形式在线发表在《自然-材料》[Nature Materials DOI: 10.1038/nmat3848]。江颖和王恩哥是文章的共同通讯作者，博士研究生郭静、孟祥志和陈基是文章的第一作者，物理学院的李新征研究员和量子材料中心的施均仁教授在理论方面提供了重要的支持和帮助。这项工作得到了国家基金委、科技部、教育部和北京大学的资助。

水的各种奇特物理和化学性质与水分子之间的氢键相互作用紧密相关，如何在分子水平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。由于氢键的形成主要源于氢原子和氧原子之间的静电作用力($O-H\cdots O$)，要精确描述水的氢键构型，不仅需要判定氧原子的位置，还必须能识别氢原子的位置，也就是要求能在亚分子级水平上探测水分子在空间中的取向。然而，由于氢原子的质量和尺寸都非常小，对水分子进行亚分子级分辨成像极具挑战性。

过去三年，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，深入到单分子的内部展开亚分子级分辨成像和操控研究，并取得了一系列研究进展：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 [Science 333, 324 (2011)]；探测到了单个萘酞菁分子内部不同振动模式的空间分布 [J. Chem. Phys. 135, 014705 (2011)]；对单个功能化分子内部的化学键实现了选择性操纵 [Nature Chemistry 5, 36 (2013)]。

在此基础上，江颖课题组与王恩哥课题组紧密配合，通过仔细的论证和探索，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 (top gate)，以皮米的精度控制针尖与水分子的距离和耦合强度，调控水分子的轨道态密度在费米能级附近的分布，从而在NaCl (001) 薄膜表面上获得了单个水分子和水团簇迄今为止最高分辨的轨道图像。这使得研究人员可以在实验中直接识别水分子的空间取向和水团簇的氢键方向性。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。

该工作不仅为水-盐相互作用的微观机制提供了新的物理图像，而且为分子间氢键相互作用的研究开辟了新的途径。另外，该工作所发展的实验技术还可进一步应用于原子尺度上的氢键动力学研究，比如质子传输、氢键的形成和断裂、振动弛豫等。



图a: NaCl(001)薄膜表面吸附的单个水分子和水分子四聚体的三维STM图像。图b和图c分别是单个水分子的HOMO和LUMO轨道STM图像。图d和图e是两种具有不同氢键手性的水分子四聚体的HOMO轨道STM图像。图f-i: 由第一性原理计算得到的与图b-e相对应的轨道图像。

编辑: 舍予



北京大学官方微博



北京大学新闻网



北京大学官方微信



[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



本网介绍 | 设为首页 | 加入收藏 | 校内电话 | 诚聘英才 | 新闻投稿

投稿地址 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