

---

# 科学家揭示油-水界面微观结构与超强电场

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/32318.html>

*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

科学家揭示油-水界面微观结构与超强电场。

近日，美国哥伦比亚大学闵玮课题组与加州大学伯克利分校Teresa Head-Gordon课题组在水在疏水界面的结构及电场特性研究方面取得进展。相关研究成果以Water Structure and Electric Fields at the Interface of Oil Droplets为题，于2025年3月19日发表在Nature期刊上。

论文的共同通讯作者包括闵玮教授、Head-Gordon教授以及施立雪博士（前闵玮课题组博士后，现为复旦大学生物医学研究院研究员），施立雪博士与Allen LaCour博士为共同第一作者。

该研究发现油-水介观界面处的水分子结构无序化及超强电场现象，为界面水的物理化学特性及其在化学、生物学、材料科学等多个领域的影响提供了新的认识。

界面水的科学之谜

水作为自然界最重要的分子之一，其在界面环境下的行为迥异于体相水。界面水的氢键网络结构、取向及动力学性质受界面效应影响显著，因此在化学、生物学、材料科学、地质学及工程学等诸多领域具有深远影响。例如，近年来微液滴化学及接触电催化等新兴研究领域揭示了界面水对反应性的非凡影响。然而，长期以来，对于水在疏水界面的氢键网络是更有序还是更无序这一基本问题，科学界存在长期争议，不同研究得出了截然不同的结论，限制了人们对界面水化学活性的理解。

阻碍科学家解决这一问题的核心挑战在于界面水的实验观测难度极高。界面水层厚度仅为几纳米，而体相水信号往往占据主导地位，使得传统实验手段难以精准探测其结构。尽管振动和频率生成光谱（VSFG）作为一种非线性光谱技术，被认为是研究界面水的有效工具，并在过去三十年间广泛用于疏水界面研究，但不同实验室的数据却常常相互矛盾。这种分歧可能源于样品制备中的不可控因素（如部分润湿、表面活性杂质等），以及VSFG信号可能受到界面附近的体相水影响，导致测量结果缺乏绝对的界面特异性。

突破性方法：Raman-MCR光谱技术

为了克服这些实验挑战，该研究团队创新性地提出了一种全新的界面探测方法——高分辨率拉曼光谱结合多元曲线分解（Raman-MCR）技术。这一方法最初用于研究均相小分子溶液，本研究首次将其应用于介观尺度界面的探测。Raman-MCR通过分解拉曼光谱，提取出界面相关的信号，实现了对溶液环境中界面的选择性测量。

---

相比传统的VSFG或VSFS技术，Raman-MCR具有显著优势：1. 避免了VSFG受限于平面界面的缺陷，可应用于乳液体系；2. 光谱信号直接可与体相水对比，有助于精确揭示界面结构的变化；3. 减少了样品制备过程中的不可控因素，提高测量的可靠性。

核心发现：界面水的无序化结构与超强电场

### (1) 界面水的无序化

研究发现， $3250\text{cm}^{-1}$ 处的OH伸缩振动肩峰在油-水界面几乎完全消失，而这一峰通常与强氢键及有序结构相关。这一现象与小疏水溶质在水溶液中的相反趋势形成对比，表明油-水界面的水分子氢键结构更无序，且氢键强度较弱。分子动力学（MD）模拟进一步验证了这一结论，显示界面处水分子的四面体结构显著破坏。

此外，研究还发现，约25%的界面水分子呈现O-H悬挂键（dangling O-H，即自由OH伸缩峰），进一步印证了界面氢键网络的紊乱特性。这一无序化结构可能对界面吸附、分子结合及界面催化反应具有重要影响。

### (2) 油-水界面的超强电场

更令人惊讶的是，该研究首次定量测得了油-水界面处的电场强度高达 $40\text{-}90\text{MV/cm}$ ，这一强电场远超此前的估计，并接近某些生物酶活性位点处的静电场强度。研究发现：• 自由OH伸缩峰（ $\sim 3575\text{cm}^{-1}$ ）发生 $95\text{cm}^{-1}$ 的红移，与平面油-水界面上的已知值（ $\sim 3669\text{cm}^{-1}$ ）相比，明显向低能量方向偏移；实验与理论计算均表明，该红移来源于界面处的超强电场；进一步实验显示，降低油滴 电位会减少红移幅度，这一结果支持了界面电场源于油滴电荷的静电起源。

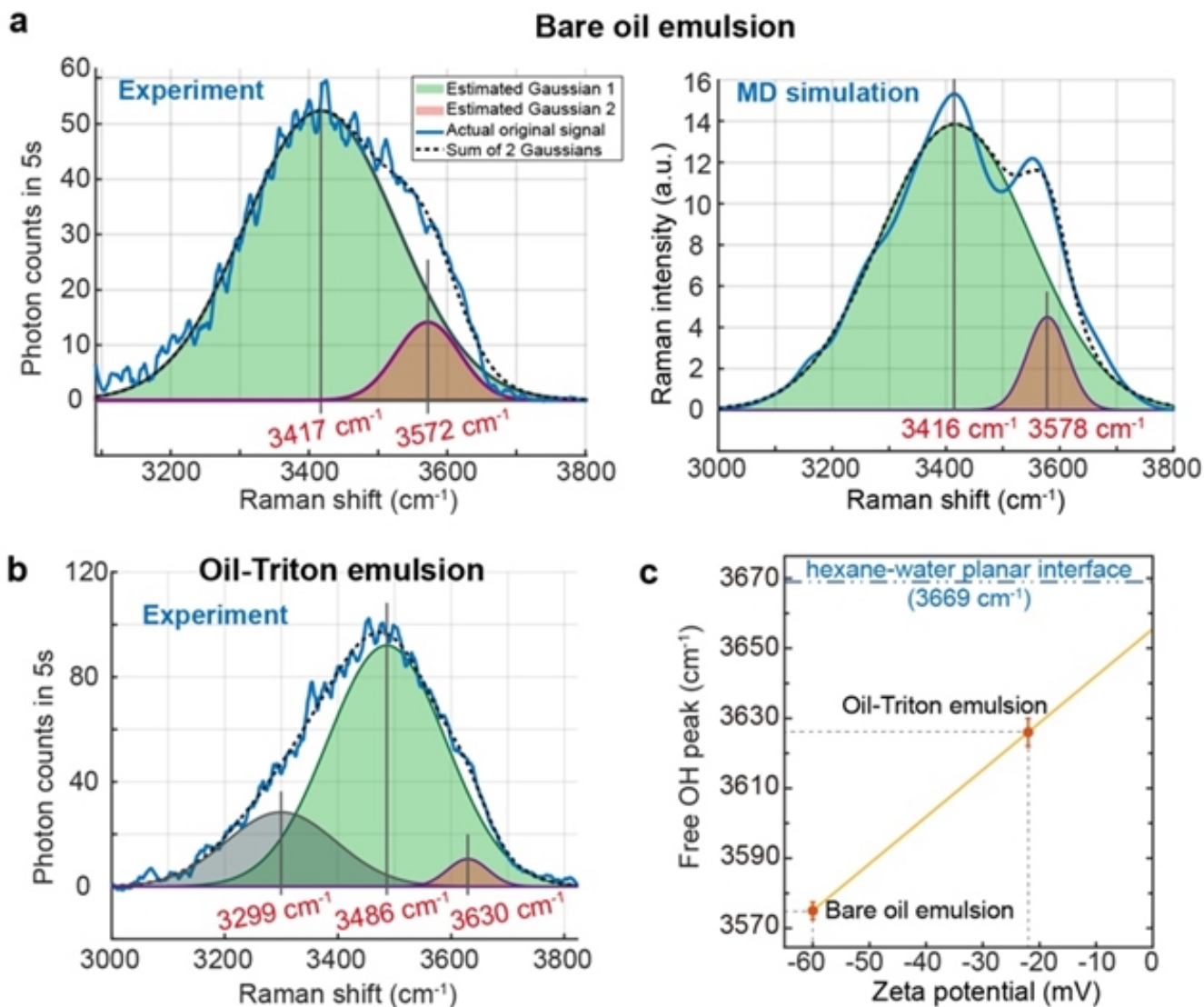


图1：纳米油滴界面水的拉曼光谱。（a）十六烷纳米油滴样品；（b）十六烷-曲拉通X100纳米油滴样品；（c）自由OH伸缩峰与油滴 电位关系。

科学意义：界面电场对化学反应的深远影响

这一超强电场对界面化学反应性具有重大影响。研究表明：该电场可显著降低化学反应的自由能势垒，使反应速率在室温下提高超过3000倍；这一机制可能是水微液滴化学中反应速率提升103-106倍的关键因素；该发现可能为接触电催化等新兴领域提供理论基础，揭示水在界面上的非均相氧化还原过程。

此外，这一研究可能在催化化学、绿色合成、生物化学、环境科学等领域带来突破性进展。

未来，这一研究方向可能继续拓展至更多复杂界面体系，如生物膜、纳米颗粒表面及气-液界面，推动界面科学的进一步发展。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-025-08702-y>

---

作者：闵玮等 来源：《自然》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发