# 核量子效应促进金属钌表面水分解机制研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/33177.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！*

**核量子效应促进金属钌表面水分解机制研究**
**取得进展**

。水在固体表面的吸附与解离行为直接影响着材料表面的稳定性、腐蚀防护、光催化水分解和电化学制氢等诸多关键过程。然而，由于固-水界面相互作用以及水中氢键网络的相互竞争，导致金属表面的水分子构型十分复杂。比如，金属钌表面的水是以分子态吸附还是解离态存在，学术界长期存在争议。实验手段因受限于时空分辨率，难以捕捉水的动态构型，导致部分结果支持金属钌表面水以分子态吸附，而另一些实验则支持水以解离态吸附。

针对这一科学难题，中国科学院金属研究所陈星秋、刘培涛团队发展了升级版矩张量机器学习势模型，通过模拟退火并结合遗传算法优化矩张量缩并路径，使得非等价中间张量数量及缩并次数最低，实现了精度与效率兼顾，不但在计算精度方面接近密度泛函理论精度，能准确捕捉界面水复杂的结构和氢键的微妙变化，而且计算效率也大幅度提升，为复杂体系的跨尺度原子模拟提供了新手段。

研究团队利用该计算工具，通过路径积分分子动力学模拟，首次在亚微秒（几百纳秒）时间尺度上模拟揭示了氢质子量子隧穿的动态过程，不仅捕捉到氢原子的量子离域特性，还揭示了金属钌（0001）表面水分子通过量子协同机制
分解为氢离子（$H^+$）和氢氧根离子（$OH^-$
）的完整路径，在原子尺度模拟实现了水分子在核量子效应驱动下的解离现象，为金属钌表面水分子分解提供了科学依据，解决了领域内的这一长期争议。

研究发现，核量子效应使质子发生离域，将质子转移能垒降低了近一半，极大促进了质子在水分子间的快速转移。相比之下，经典分子动力学模拟由于未考虑核量子效应，即使在微秒时间尺度内也未能观察到水的分解现象。同时，核量子效应驱动长程质子转移，水分子分解过程中质子转移跨越了多达5个水分子，形成“ 质子接力 ”式分解机制，与局域反应路径计算结果截然不同。

该研究揭示了核量子效应在质子转移动力学中的关键作用，为金属表面水吸附和水介导化学反应等研究开辟了新视角。

近期，相关研究成果以*Quantum Delocalization Enables Water Dissociation on Ru(0001)*为题，发表在《物理评论快报》（*Physical Review Letters*）上。研究工作得到国家自然科学基金委、国家重点研发计划等的支持。

全文链接

金属钌（0001）表面水分子吸附构型的能量预测

机器学习势加速的路径积分分子动力学模拟揭示核量子效应驱动的水分子长程解离机制

核量子效应诱导的水分子结构演变与质子转移能垒变化

研究团队单位：金属研究所

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转发