
高压盐水溶液结构与动力学研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41009.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！

高压盐水溶液结构与动力学研究获进展。

水在吉帕（GPa）级压力下的行为对理解地球内部地质过程、富水行星的演化及水热化学反应机制至关重要。然而，有关吉帕压力下溶液中水的结构和动力学的直接实验观察较少，溶解离子与施加压力对水结构和动力学的影响是叠加还是拮抗，学术界尚存争议。

近期，中国科学院青海盐湖研究所团队利用高通量中子散射技术，在原子尺度上揭示了吉帕压力下碱金属氯化物水溶液中水的结构演变与扩散行为，为理解高压水溶液的物化性质提供了全新视角。

研究团队系统探究了纯水及3mol/kg LiCl、NaCl、KCl、RbCl、CsCl水溶液在0.1MPa和0.7GPa压力下的结构与动力学。通过实验数据驱动的全原子建模方法，团队定量提取了水分子间Ow-Ow、Ow-Dw及Dw-Dw的偏对分布函数，并结合QENS数据获得了水分子在常压和高压下的自扩散系数。

研究发现，溶解离子的作用不等同于对水施加压力。在0.7GPa下，水的四面体氢键网络结构坍塌，转变为类似液态氩的密堆积无序结构。Ow-Ow第一配位层的配位数从常压下的4.2急剧增加至4.6，Ow-Ow-Ow角分布中代表四面体结构的98°峰显著减弱，而代表间隙水分子的52°峰增强并移至43°。这一转变源于第二配位层的瓦解和间隙水分子的形成。相比之下，常压下溶解离子虽能扰乱水的第二层，但水的四面体网络结构仍得以保持。

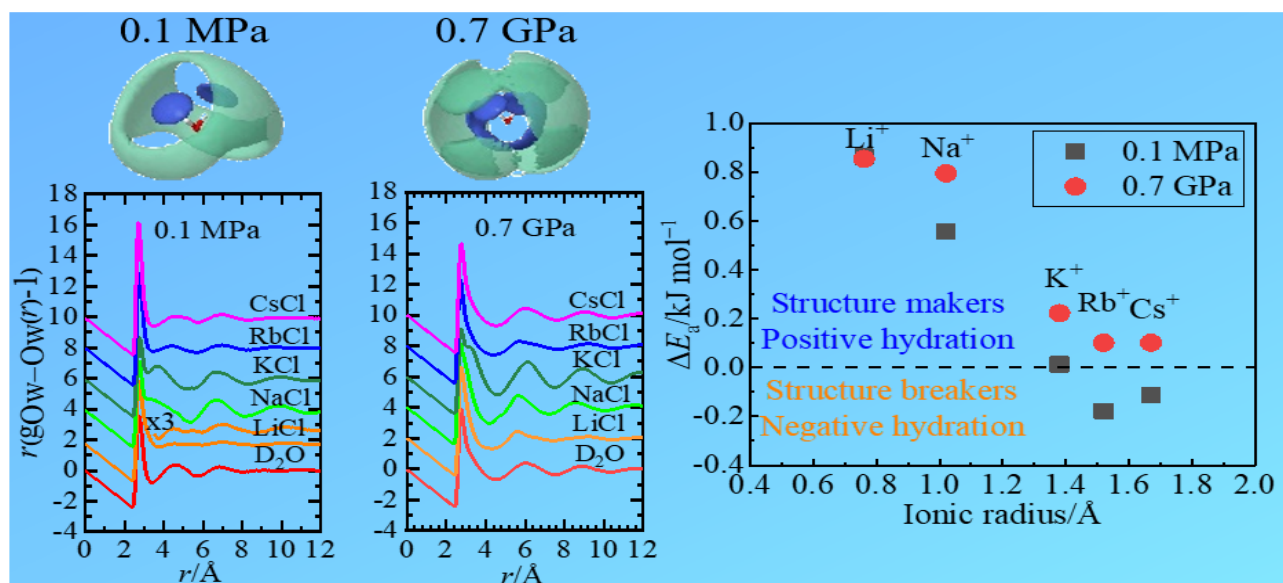
此外，研究揭示了水的异常扩散行为在高压下消失的现象。常压下，水分子扩散系数随离子种类呈 $\text{Li}^+ < \text{Na}^+ < \text{H}_2\text{O} \approx \text{K}^+ < \text{Rb}^+ \approx \text{Cs}^+$ 的规律， Li^+ 和 Na^+

表现为结构促进者（正水合，活化能为正）， Rb^+ 和 Cs^+

表现为结构破坏者（负水合，活化能为负）。在0.7GPa下，所有离子的扩散系数均低于纯水，活化能全部变为正值，传统意义上的正/负水化及结构促进/破坏概念不再适用。这一反常现象的消失与水四面体网络结构的坍塌密切相关，高压下大量非氢键结合的间隙水分子进入离子周围，形成更致密、更具结构性的溶剂化层。

相关研究成果发表在《物理化学快报》（*The Journal of Physical Chemistry Letters*）上。研究工作得到中国科学院战略性先导科技专项和青海省自然科学基金等的支持。

[论文链接](#)



中子散射实验观测吉帕压力下碱金属氯化物水溶液中水的结构和动力学

研究团队单位：青海盐湖研究所

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