等效势：微波与界面耦合用于建模与调控流体结构的纽带

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/41545.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！

等效势：微波与界面耦合用于建模与调控流体结构的纽带。化学工程领域对电气化的推动正在加速高效外场强化技术的发展，例如微波技术，但微纳尺度流体结构的出现，以及界面效应与微波之间复杂的相互作用，给现有的理论框架带来了重大挑战。传统热力学模型依赖于唯象学方法与宏观实验数据，难以精准描-
述微波场中界面附近流体结构的微观变化。针对这一局限，南京工业大学朱家华团队在ENG. Chem. Eng.期刊发表观点文章，从量子力学出发，提出等效势（equivalent potential）概念，为统一界面与微波的作用提供了新的思路。

核心观点

宏观热力学模型难以穿透微纳界面黑箱

传统热力学模型依赖宏观实验数据的经验性拟合，缺乏微纳尺度的流体结构-物性关系的物理根基。当微波介入后，界面极化显著改变分子间相互作用并诱导团簇结构形成，此时基于牛顿力学的经典相互作用描述已显不足，亟需引入量子力学视角重构理论框架。

等效势统一界面-微波双重效应

从多体薛定谔方程出发，将包围分子团簇的微环境作用，包括外场效应、界面几何约束与电子效应，整体封装为等效势项。借助势能可加性，将界面相互作用与外场效应两类不同的调控变量纳入同一理论框架，为外场-界面协同作用提供了可计算化的实现路径。

多尺度验证揭示流体结构转变规律

密度泛函计算表明，较高的等效势环境显著约束分子运动，使分子的微观状态分布趋于集中。分子动力学模拟进一步显示，在2 eV · Å − 1势能梯度下，界面水分子从四配位网络结构转变为孤立有序结构，不同团簇结构的配分函数差异与界面水转动弛豫时间的显著变化，直接证明了等效势对团簇结构的定向调控能力以及带来的流体物性改变。

结论与展望

本文提出了以等效势为核心的外场耦合理论框架，建立了流体结构调控的基本原理，为理性设计

流体结构、强化微波化工过程提供了可行路径；同时，该等效势还具有普适拓展能力，可推广至电场、磁场、光场等外场作用体系，进而发展为统一描述界面与各类外场相互作用的通用工具。未来需要（1）发展高时空分辨原位表征技术，建立真实体系中的流体结构与等效势之间的映射关系；（2）结合人工智能，发展可解耦界面与外场的等效场理论，实现材料高通量筛选与外场条件优化；（3）建立数据－机制融合方法，推动外场耦合化工体系的理论发展。（来源：EngineeringJournals微信公众号）

相关论文信息：https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2648-4

作者：朱家华等 来源：《工程·化学工程》

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