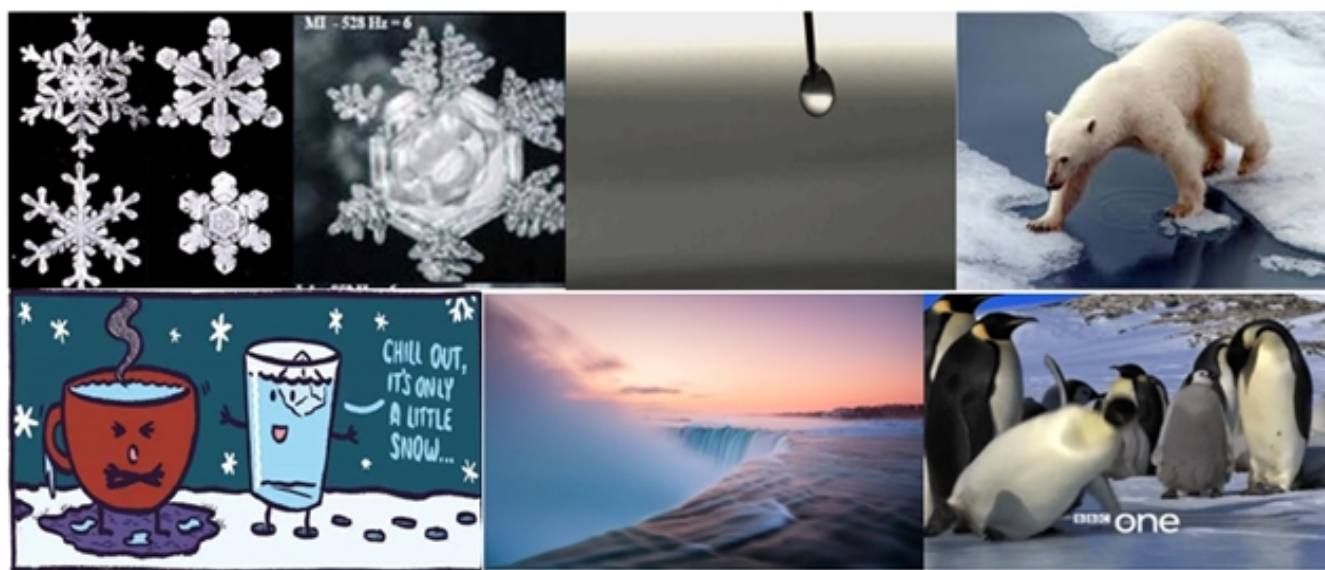

氢键规则：带你探索神奇的冰水世界

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/7106.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！

氢键规则：带你探索神奇的冰水世界。水是一切生命的起源和重要组成部分，也是构成炫彩世界的重要元素，留下了不计其数的浪漫奇迹和不解悬疑。爱的声音能结出近乎完美的冰晶结构，而厌恶情绪则会形成奇异的丑陋形状；液滴能在水面上踢踏舞动，逐渐缩小、消失；悬于水面的浮冰守护着寒带动物的生存与繁衍；一杯热的冰淇淋混合物比冷的能更快速地冰冻成型；悬于空中既不分离也不凝结的云与雾；憨憨企鹅在冰面上自由滑翔；等等。



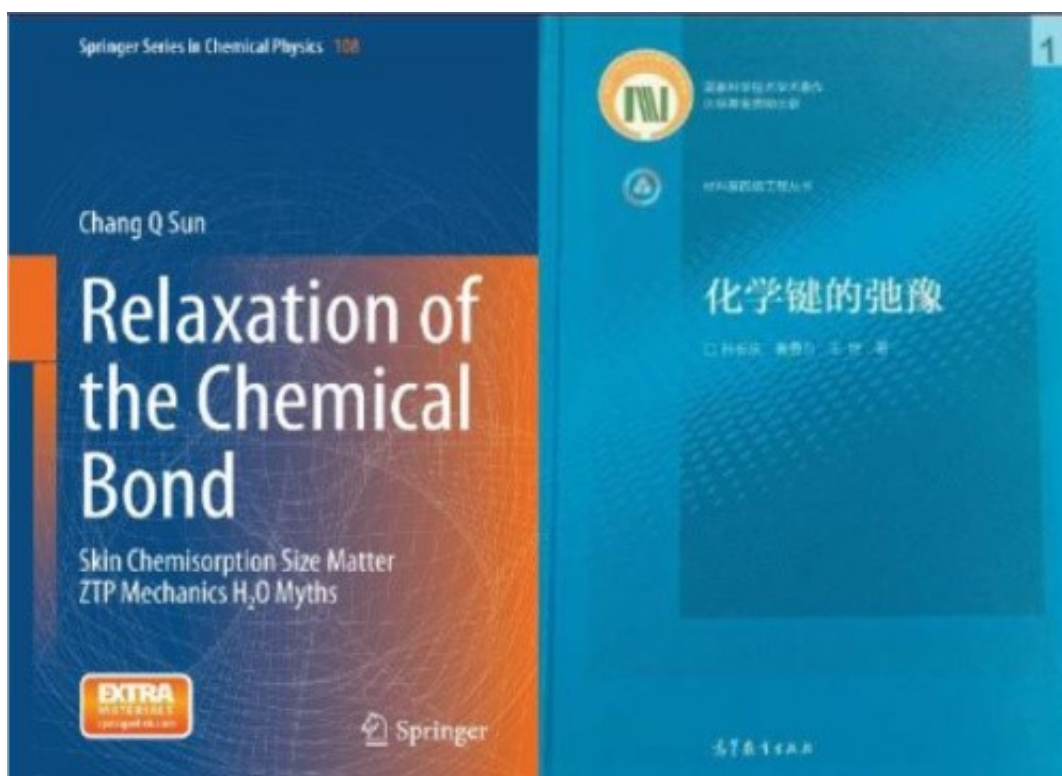
神奇的冰水异象

人们对水的研究最多，然而知之最少；研究投入越多，手段越先进，认知却越迷茫。英国《自然》杂志前资深编辑菲利普·鲍尔曾经指出，水真的是太神奇、太反常、太具有挑战性了，甚至断言根本就不可能有人真正知道水的秘密。美国《科学》杂志也在2005年纪念创刊125周年之际将水的结构列为人类亟需解决的125个难题之一。



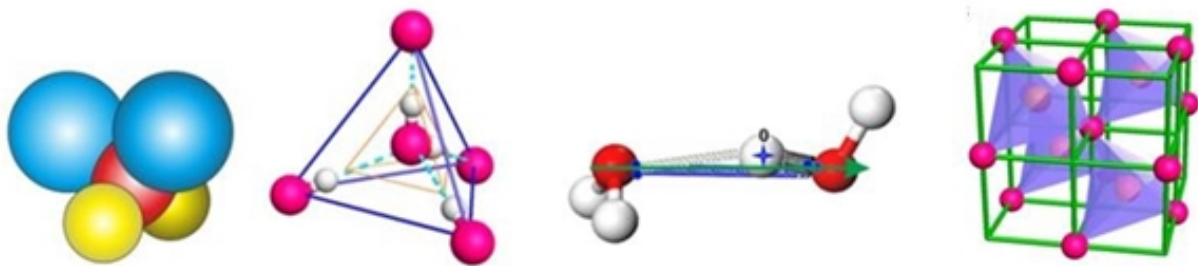
所有的努力对水科学研究进展都做出了不可磨灭的贡献，所有的艰辛付出都值得敬佩，所有的成果都应该珍惜。但是当某问题久思而不得其解时，一定是由于某种原理上的危机和对关键因素的忽视。系统地破解水的结构和反常物性悬疑的挑战提示我们必须从源头重新思考。

孙长庆教授三十余年来主攻化学键的弛豫，系列成果汇集出版了双语专著Relaxation of the Chemical Bond(Springer, 2014)、《化学键的弛豫》(高等教育出版社, 2017)，提出控制键与非键的形成与弛豫以及相应的电子转移、极化、局域化、致密化动力学是调制物质结构和性能的唯一途径的思想。



也许是注定的缘分，深秋的某天，孙教授在暖暖地泡脚时，脑中的某条化学键突然兴奋起来，激发了灵感!冰与水不也是化学键链接而成的嘛，是否找对了基本的键单元就可以从源头来探究冰水的各种奇异物性?自此，孙教授一头扎了进去。

水分子(H_2O)含两个氢原子一个氧原子，及其简单。但是，氧原子因杂化形成四个电子轨道，构成以氧原子为中心的正四面体结构。自此，中心水分子的最近邻水分子分居于正四面体顶角，并能从中提纯 $\text{O}:\text{H}-\text{O}$ 氢键单元，也能拓展出水分子的空间堆垛状态。



氧原子杂化、水分子配位、O:H—O氢键单元以及水分子空间堆垛

O:H—O氢键单元结构上包含O:H非键和O—H极性共价键两分段，单元内作用力包含O:H的类范德瓦耳斯弱作用、O—H共价强作用以及O—O上电子对间的库仑排斥作用。O:H和H—O两段一弱一强，在库仑调制下协同弛豫，故称为O:H—O非对称强耦合振子对。

采用这一条非对称超短程强耦合氢键振子对代表冰水样本中所有的同类氢键，并专注于这条代表键的时空与能量行为以及它的演变对可测物理量的贡献，这是长期化学键弛豫研究形成的思维模式。一系列实验和模拟结果验证O:H—O氢键非对称耦合振子对的受激协同弛豫及其分段比热差异主导冰水的单晶结构和超常自适应、自愈合、强记忆、高敏感等特性。

The Telegraph

氢键协同弛豫解读冰水异象——热水为什么比冷水结冰快?(, 2015)

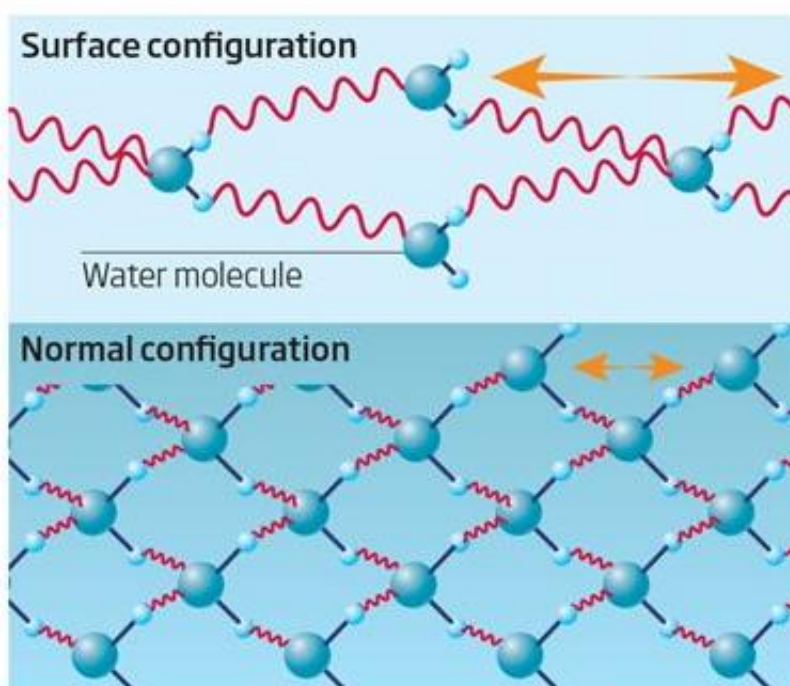


加热会缩短并硬化H—O共价键，从而存储能量。倘若在冰箱里冷却，H—O共价键会以指数速率释放能量，热水会更快地失去更多能量而快速结冰，从而产生姆潘巴现象。

氢键协同弛豫解读冰水异象——冰为何如此光滑?(《新科学家(New Scientist)》, Gilead Amit, 2015-09-02)

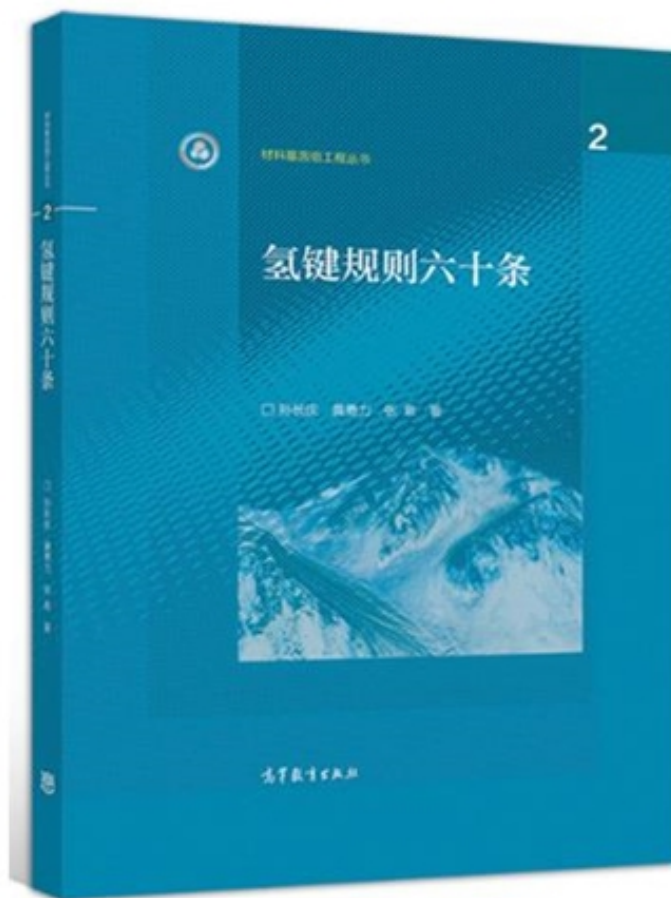
Slip sliding away

Hydrogen bonds in a supersolid surface ice layer would be longer and springier than in the normal solid - increasing **side-to-side motion** and making it more slippery



冰表面水分子之间的O:H弱键因低配位而拉伸，并不会像液态水，键不会发生断裂，冰的表面层更适合称为超固态表皮。软化的O:H键如弹簧般与冰表面接触物质表皮偶极子连接，形成静电排斥，使冰表皮呈现超润滑特征，类似磁悬浮列车的电磁力效应以及气垫船船底的空气压力效果。

《氢键规则六十条》从氢键(O:H—O)分段受激协同弛豫出发，定量破解了水的结构和冰水在外加力场、温场、电场以及改变配位环境时所显示的各种反常物性，以揭示这些悬疑的共同机制和相互关联。主要包括浮冰、复冰、润滑、过冷、过热、热水速冻，以及纳米水滴和气泡的超常热稳定性等。



冰、水与溶液研究中的关注焦点、传统认知及氢键协同弛豫理论研究最新进展

关注焦点

传统认知

研究新探

1

配位规则

或非四配位动态结构

质子和孤对电子数目以及O:H—O键构型守恒确定分子取向规则

2

作用形式

刚性或柔性偶极子近似

O:H—O非对称超短程耦合振子对

3

势能函数

双体或多体、对称或非对称

三体非对称、超短程、强耦合

4

输运规则

$2\text{H}_2\text{O} \ll \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HO}^-$ -自发质子隧穿

O:H—O分段长度和能量受激协同弛豫

5

液态结构

均相涨落或高低密度混相

超固态表皮包裹的强涨落单晶

6

温致特性

经典热力学;混相权重调控

O:H—O分段比热叠加;液态-准固态-固态温区密度振荡

7

配位弛豫

过热和过冷;力热稳定性

超固态：准固态相边界受激色散伴随电子极化密度致疏

8

压致特性

质子平移隧穿和O-O收缩

O:H缩短H—O伸长伴随极化

9

冰皮润滑

准液态 (压融、热摩擦) 润滑

界面超固态弱声子高弹性和极化电子相斥

10

压融复冰

表皮液态联接剂

O:H—O变形破损自愈合;H—O键能主导熔点

11

温水速冻

多因素定性猜测

能量存储-释放-传导-耗散：氢键记忆与表皮超固态

12

盐水溶液

溶质迁移和水合层厚

O:H—O网络离子局域极化调制氢键刚度、序度和丰度

13

酸合溶液

H[H₄O₂]+质子隧穿扩散迁移

H₃O⁺和H₂O反氢键点致脆退极化

碱合溶液

HO⁻迁移

HO⁻和O²⁺:O²⁺超氢键点压缩极化

14

电致相变

阿姆斯壮水桥

极化拓展准固态相边界

15

液态抗磁

青蛙磁悬浮

感生偶极子电流对抗源磁场

目录

第1章 神奇的水：机遇与挑战

第2章 冰水构序规则：禁戒与守恒

第3章 氢键协同弛豫：非对称耦合振子对

第4章 冰水相图：氢键弛豫表述

第5章 氢键作用势：非对称超短程强耦合

第6章 压致氢键对称：准固态相边界内敛

第7章 温驱密度振荡：氢键分段比热与准固态

第8章 低配位超固态：团簇与超微气泡

第9章 超润滑与量子摩擦：软声子弹性与静电排斥

第10章 水表皮超固态：疏水与弹性

第11章 热水速冷：氢键记忆与表皮超固态

第12章 酸碱盐水合动力学：反氢键与超氢键

第13章 水合团簇：声子寿命与黏滞性

第14章 水与水合溶液的压致液-固转变

第15章 电致准固态相边界色散

第16章 相关悬疑

第17章 理论实验处理方法

第18章 氢键规则六十条

全书自成体系、风格独特。贯穿原创性、深入性、系统性和关联性于始终。强调物理图像清晰，力求表述简单，同时也提供相关研究和历史背景兼顾通俗趣味性。

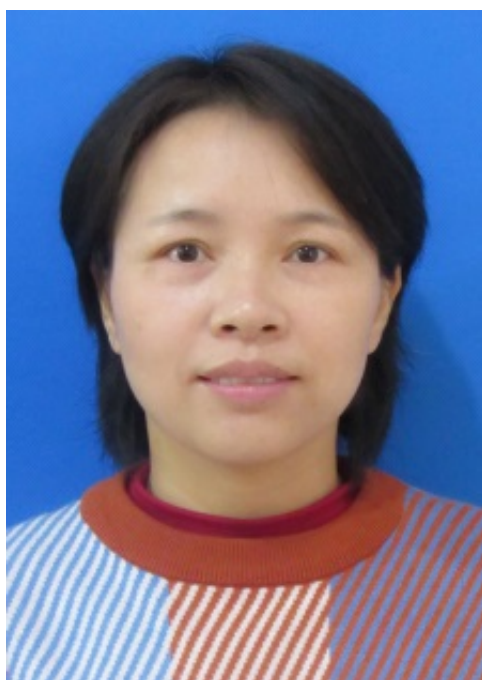
核心亮点：

- ◆ 冰水基础科学研究的新进展和发展趋势
- ◆ 悬疑的历史背景、理论学说和量化通解
- ◆ 氢键非对称耦合振子受激协同弛豫原理
- ◆ 超常自适应、自愈合、高敏感特性规则

作者简介



孙长庆，辽宁葫芦岛人。澳大利亚默多克大学1997年理学博士。现任职于新加坡南洋理工大学。主攻超常配位键和非键电子学。建立了多场键弛豫和氢键耦合振子对理论，并拥有多项计量谱学专利。著有《化学键的弛豫》《水合反应动力学》《电子声子计量谱学》等中英文专著，并在《化学评论》等期刊发表了20余篇专述。曾获夸瑞兹密一等奖和首届南洋科技创新奖。



黄勇力，湖南常德人。湘潭大学2013年工学博士。现任职于湘潭大学。研究兴趣为物理力学、氢键耦合振子对作用势、氢键受激弛豫振动力学、水合反应等。合著《化学键的弛豫》《水合反应动力学》《电子声子计量谱学》和英文版《材料的宏微观力学性能》。



张希，河南洛阳人。新加坡南洋理工大学2013年理学博士。现任职于深圳大学。研究兴趣为表面界面力学、微纳光电传感、石墨烯纳米带边界量子钉扎与极化、氢键受激弛豫的量子计算等。曾获深圳市海外高层次人才计划奖励。

延伸阅读：《化学键的弛豫》(孙长庆、黄勇力、王艳，高等教育出版社，2017)



如果说化学键的属性是链接物质的结构和性能的桥梁(Pauling, 1939)，那么我们可以通过改变外场，如温度、压强、配位和化学环境、外加电磁场及实验条件等控制化学键的形成、断裂、弛豫、振动以及相应的能量和电子动力学行为来实现对物质结构性能的改造。实现此目的的首要任务

是厘清物质的宏观物理性能对其组成原子间化学键和电子结构的依赖关系以及各物理量之间的内在联系，以实现对物质的本质及其变化规律的深入理解和正确表述。最终找出有效的控制参数和实施手段，对物质的性能进行预测并任意调控。作者及其带领的团队在过去近三十年间努力和实践，旨在探索于此。

内容简介：

本书从化学键的形成、断裂、弛豫、振动以及相应的电子能量结构和动力学角度出发，本书旨在揭示固体缺陷、表面、界面、吸附、纳米结构、界面等非常规配位系统的各种物理化学性能的微观机制及其在外场作用下的定量演化规律。着重介绍键弛豫理论、电子能量局域钉扎极化理论、局域键平均近似原理和数值算法、计量谱学实验和定量信息提取技术，及其应用实例。

全书共三篇。第一篇共九章专注于化学吸附过程中化学键-能带-势垒的弛豫动力学;第二篇共十二章主攻低配位体系的反常力学强度、热稳定性、声子激发、光发射与吸收、电子的钉扎与极化、磁性与介电等物性;第三篇共十章总结原子尺度固体包括单原子链、单层原子片、纳米孔洞、异质界面等体系在受热受力条件下的弹性与塑性力学行为。

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](https://www.iikx.com)转发