化学所首次证实“临界冰核”的存在

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/7684.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！

低温下水结冰等相变现象非常普遍，是科学研究的基本问题，同时在化学工业、低温生物学、材料科学等领域有重要的应用价值。吉布斯（Gibbs）等人近百年前基于热力学原理，提出相变的“经典成核理论”，认为如水结冰这类相变需经过一个成核过程。例如，水过冷形成小冰核，仅当形成的冰核偶然超过临界尺寸，即形成临界核时，相变才能自发发生。近数十年来，随着微观探测技术的发展，证实了经典成核理论的许多推论，但也发现了一些超出其预期的结果。特别是对成核的核心概念——临界核的存在性，始终无法给出直接的实验证据，因而阻碍了对自然界中相变成核这一重要物理现象的进一步理解，甚至引起对宏观推论给出微观层面临界核概念的实用性也有疑问。具体到水结冰相变，归因于水分子的特殊复杂性以及与我们生活密切相关，人们对探测临界冰核更是期盼已久，但经诸多努力却不能给出清晰结果，成为这个领域一个悬而未决的基本问题。

近日，中国科学院化学研究所王健君课题组与中国科学院大学教授周昕等合作，创造性地通过利用尺寸固定的纳米颗粒去探测冰成核与纳米颗粒的尺寸匹配信号，从而探测微小瞬时的临界核的存在和特征。通过研究纳米颗粒尺寸与其促进冰晶成核能力的关系，研究人员发现，仅当纳米颗粒的尺寸大于某个临界值时才能有效地促进冰成核发生，而较小尺寸的纳米颗粒则几乎不能帮助冰核形成。而且纳米颗粒尺寸在促进冰成核能力方面的尺寸阈值现象是普遍的，与过冷温度简单成反比关系，几乎不依赖于纳米颗粒的种类、结构等特征。该实验结果与经典成核理论关于临界核和自由能的计算预言完全相符，首次在实验上证实了水结冰过程中临界冰核的存在以及它的尺寸和过冷温度的依赖关系。该项课题研究有效澄清了近几十年来关于“经典成核理论”在描述原子尺度的临界核特征的有效性方面的普遍疑虑，加深了对水结冰这一重要相变现象的微观机制的理解。该工作对水结冰机理、相变现象乃至统计物理中宏观和微观关系等都有重要意义。同时这种探测临界冰核的策略也可以用于其它相变成核过程的临界核探测，从而可能改进对整个相变成核领域的认识。此外，该研究结果表明：设计与临界冰核尺寸相当的图案化表面，可以达到高效调控冰晶形成的目的，为防覆冰涂层的设计提供了新思路。相关研究工作发表在近期的《自然》杂志上（*Nature*, 576, 437-441(2019)），通讯作者为王健君和周昕，第一作者为白国英。

图：a, 不同纳米片冰成核能力的突变; b, 氧化石墨烯表面冰成核自由能垒的突变，插图展示了纳米片尺寸小于或大于临界冰核直径时临界冰核形状的示意图。当纳米片尺寸小于临界冰核时，冰核生长受限于纳米片边缘，导致冰核形状改变，从而使成核自由能垒急剧增大。

研究团队单位：化学研究所

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