



水的微观性质理论研究专题·编者按

水是自然界最丰富、最重要的物质之一,有很多独特的甚至反常的性质。“水”问题和“能源”问题一样,曾被列为人类未来50年的最大挑战,受到了各国的高度关注.由于美国和欧洲这些发达国家和地区本身基本不缺水,水科学并没有成为这些发达国家和地区战略重点支持的研究领域,这也导致近年来水科学基础研究重大突破相对比较稀少,相关水技术进展较慢.然而,由于我国面临土地沙漠化、巨大人口压力、以及本身水资源总量匮乏,“水”问题已经成为我国今后数十年乃至更长时间里不得不面临的艰难问题,因此,我国急需发展与自己国情相适应的水科学和水技术,重点发展新概念、新方法和新技术.2008年*Nature*杂志水专辑刊登了系列论文(*Nature* **452**, 7185 (2008)),覆盖了解决淡水短缺、生物医药、环境保护等多个重要问题.实际上,地球上的各种过程,包括物理、化学、环境和生物等各个方面,大多数与微观尺度的水息息相关.所以,要实现基础研究和新技术的率先突破,我们认为,首先需要深入地理解水的微观结构与动力学性质.

但是,对水的微观结构与动力学的研究是非常艰难的课题,例如“水的结构”这样看似简单的问题却长久困扰着科学家.2005年,水的结构被*Science*杂志(*Science* **309**,75 (2005))列为125个科学难题之一.关于水的局部微观结构正在进行着新一轮的争论(*Science* **306**, 2013 (2004)),目前争论的焦点落在水分子间通过氢键会形成什么样的局部微结构、水是多组分体系还是连续的整体、每个水分子的平均氢键数目、氢键排列方式、氢键网络大小、水分子的转动和振动动力学、水的量子效应等方面.水是完美的连续介质,还是内部形成大小不同的分子团簇(*PNAS* **106**,15214 (2009))也是一个争议性的话题.如果水中加入各种各样的离子,情况就会更加复杂.

水的作用效应在许多情况下是在界面上发生的,强烈地依赖于水分子与界面的相互作用.关于水在固体表面上的凝聚、蒸发、输运和光催化分解,水在地质学过程中的作用,微乳液体系中的纳米粒子合成、微流控制及机理、水的净化、电极表面上的电化学反应,水在生物过程中的角色等等,都需要从分子甚至电子态的层次来理解水同界面的相互作用.表面(界面)上的水表现出明显不同于体相的结构和性质,如水及水合离子的结构(特别是有序结构)、水分子的振动与取向弛豫、密度和比热等基本物理参数、晶化和非晶化能力及转变温度、扩散系数等等.表面(界面)水的结构及性质还会随外部因素而变化,包括环境中各种分子和离子对水在表面(界面)如何吸附以及与表面(界面)水的结构关联等问题,这些方面同样会影响水分子与界面之间的相互作用.

我们收集了关于界面水、离子水溶液、低维气体水合物、生物分子表面水、水的相变和水的微观性质研究的谱学方法等相关选题的理论研究在《中国科学:物理学 力学 天文学》期刊汇集成这个专题,期望对推动国内水的微观性质理论和实验研究有所帮助.

方海平

中国科学院上海应用物理研究所

引用格式: 方海平. 水的微观性质理论研究专题·编者按. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2016, 46: 057001

Fang H P. Special Topic: Theoretical study on the behaviour of liquid water at microscopic level (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2016, 46: 057001, doi: [10.1360/SSPMA2016-00135](https://doi.org/10.1360/SSPMA2016-00135)