

核量子效应促进金属钌表面水分解机制研究取得进展

水在固体表面的吸附与解离行为直接影响着材料表面的稳定性、腐蚀防护、光催化水分解和电化学制氢等诸多关键过程。然而，由于固-水界面相互作用以及水中氢键网络的相互竞争，导致金属表面的水分子构型十分复杂。比如，金属钌表面的水是以分子态吸附还是解离态存在，学术界长期存在争议。实验手段因受限于时空分辨率，难以捕捉水的动态构型，导致部分结果支持金属钌表面水以分子态吸附，而另一些实验则支持水以解离态吸附。

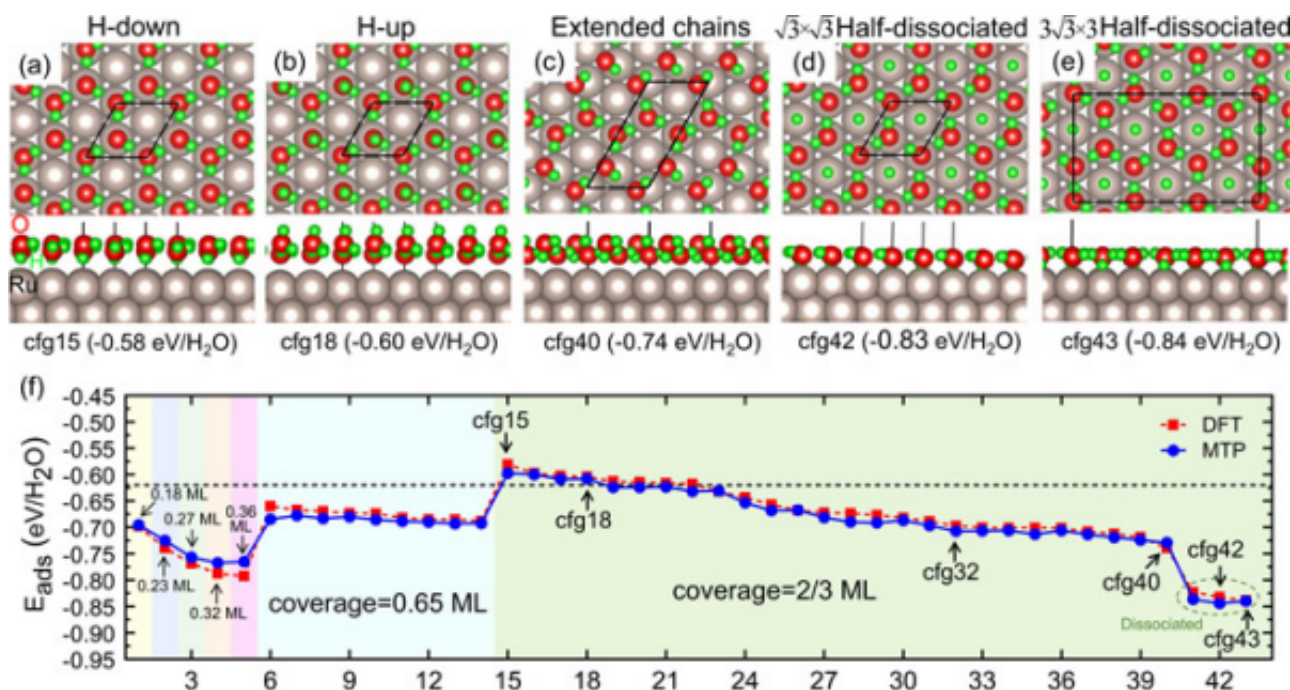
针对这一科学难题，中国科学院金属研究所陈星秋、刘培涛团队发展了升级版矩张量机器学习势模型，通过模拟退火并结合遗传算法优化矩张量缩并路径，使得非等价中间张量数量及缩并次数最低，实现了精度与效率兼顾，不但在计算精度方面接近密度泛函理论精度，能准确捕捉界面水复杂的结构和氢键的微妙变化，而且计算效率也大幅度提升，为复杂体系的跨尺度原子模拟提供了新手段。

研究团队利用该计算工具，通过路径积分分子动力学模拟，首次在亚微秒（几百纳秒）时间尺度上模拟揭示了氢质子量子隧穿的动态过程，不仅捕捉到氢原子的量子离域特性，还揭示了金属钌（0001）表面水分子通过量子协同机制分解为氢离子（H⁺）和氢氧根离子（OH⁻）的完整路径，在原子尺度模拟实现了水分子在核量子效应驱动下的解离现象，为金属钌表面水分子分解提供了科学依据，解决了领域内的这一长期争议。

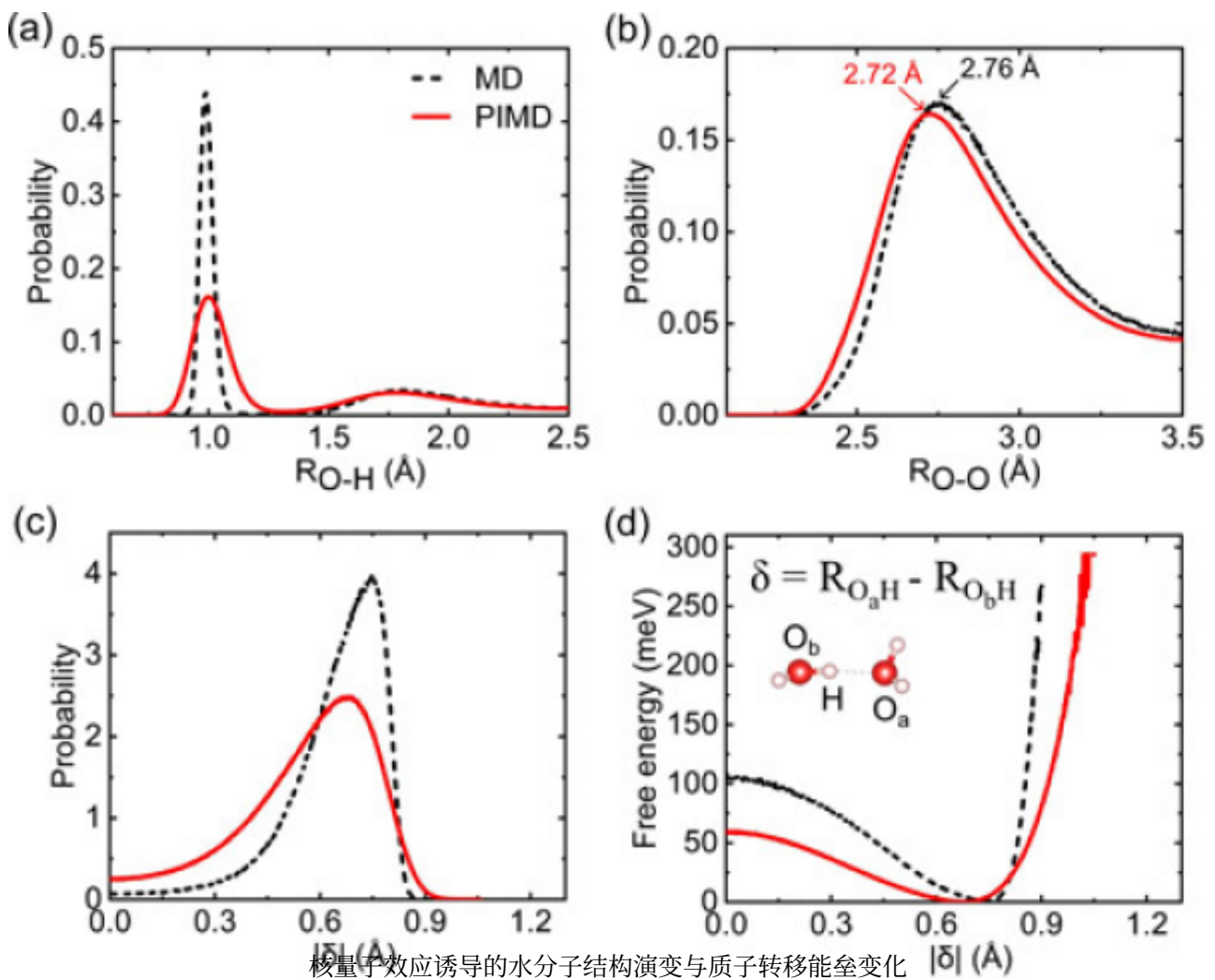
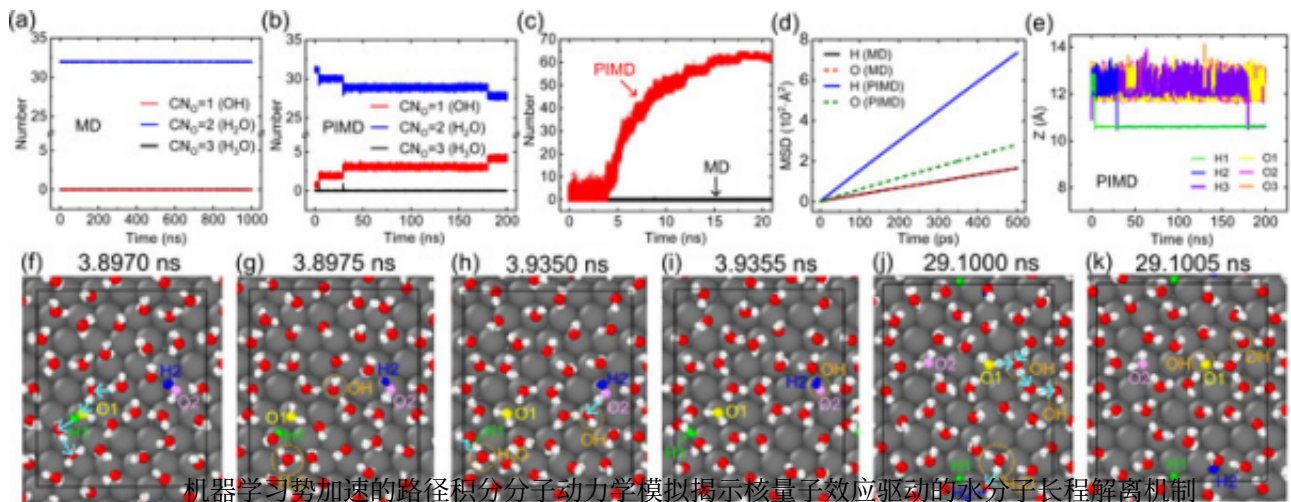
研究发现，核量子效应使质子发生离域，将质子转移能垒降低了近一半，极大促进了质子在水分子间的快速转移。相比之下，经典分子动力学模拟由于未考虑核量子效应，即使在微秒时间尺度内也未能观察到水的分解现象。同时，核量子效应驱动长程质子转移，水分子分解过程中质子转移跨越了多达5个水分子，形成“质子接力”式分解机制，与局域反应路径计算结果截然不同。

该研究揭示了核量子效应在质子转移动力学中的关键作用，为金属表面水吸附和水介导化学反应等研究开辟了新视角。

近期，相关研究成果以Quantum Delocalization Enables Water Dissociation on Ru(0001)为题，发表在《物理评论快报》（Physical Review Letters）上。研究工作得到国家自然科学基金委、国家重点研发计划等的支持。



金属钌（0001）表面水分子吸附构型的能量预测



原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/226497.html>