科学通报 2026 年 第 71 卷 第 22 期: 5203 ~ 5205
悦读科学
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

纳米受限水的相变与超润滑研究

张世辰[1], 赵正朴[1], 边珂[1], 江颖[1,2,3*]

1. 北京大学物理学院量子材料科学中心, 北京 100871
2. 北京大学轻元素先进材料研究中心, 北京 100871
3. 北京轻元素量子材料交叉平台, 北京 101407
* 联系人, E-mail: yjiang@pku.edu.cn

Phase transition and superlubricity of nanoconfined water

Shichen Zhang[1], Zhengpu Zhao[1], Ke Bian[1] & Ying Jiang[1,2,3*]

[1] *International Center for Quantum Materials, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China*
[2] *Research Center for Light-Element Advanced Materials, Peking University, Beijing 100871, China*
[3] *Interdisciplinary Institute of Light-Element Quantum Materials, Beijing 101407, China*
* Corresponding author, E-mail: yjiang@pku.edu.cn

doi: 10.1360/CSB-2026-0516

水是自然界最重要的物质之一. 纳米受限水特指被限制在纳米和亚纳米尺度空间(如矿石层间、蛋白质通道或材料孔道)的水. 由于复杂的尺寸效应和表界面相互作用, 纳米受限水会涌现出超快传输、超高(低)介电常数、铁电行为等迥异于体相水的反常物性. 这些特性在海水淡化、水收集、能量转换、生物工程等领域具有重大应用前景, 使得纳米受限水成为近年来物理、化学、材料、能源与生命科学交叉领域的前沿热点. 研究纳米受限水的关键在于解析其氢键网络的结构与动力学行为. 近20年来, 许多理论工作尝试解析纳米受限水的相图. 然而, 鲜有实验手段能直接从微观角度观测纳米受限水的结构与动力学, 亦无法准确获悉其相态. 因此, 纳米受限水诸多反常物性的根源长期缺乏统一的物理图像. 最近, 我们将qPlus型原子力显微术(atomic force microscopy, AFM)与基于金刚石氮-空位(nitrogen-vacancy, NV)色心的量子传感技术高效融合, 创新性地发展出一种高分辨量子传感显微术, 突破了传统探测手段的灵敏度限制, 发现在二维纳米限域环境中, 水会发生从液态到固态的室温相变, 形成二维类冰结构. 此外, 我们还发现二维冰在石墨烯表面表现出近乎无摩擦的"超润滑"输运特性. 相关成果相继发表在*Science*[1]与*Nature Materials*[2].

纳米受限水往往埋藏于各类纳米孔道结构中, 水分子数量极少(通常小于10^{-21} L), 其结构呈现出在纳米尺度的非均匀性, 且水分子间的氢键相互作用是一种弱键, 极易被探测手段干扰. 核磁共振、红外光谱等传统谱学表征方法只能提供巨量水分子的平均信息, 难以分辨纳米受限水的局域结构特征; 而透射电子显微镜的高能电子束则会破坏氢键网络的本征结构. 金刚石NV色心作为一种固态自旋量子比特, 在室温下具有较长的自旋相干时间, 其电子自旋态对局部磁场极为敏感, 并可通过光学方式进行读出, 为纳米尺度、低扰动的局域磁场探测提供了独特手段. 因此, 我们基于单个NV色心的超高磁场灵敏度[3]发展了纳米尺度的核磁共振技术, 通过观测质子自旋态的相干性演化以及捕捉质子间的磁偶极相互作用实现了室温条件下纳米受限水的结构和动力学的精准解析[3].

我们在亲水性金刚石表面覆盖六方氮化硼薄片, 构建了厚度可精确调控的二维纳米受限水体系. 一方面, 利用NV色心探测受限水的结构和动力学信息; 另一方面, 借助qPlus-AFM精确测量二维纳米受限水的受限尺寸, 从而系统性刻画了由受限诱导的相变过程(图1(a))[2]. 实验结果表明, 受限尺寸对水的物态演化具有决定性作用. 当受限尺寸大于1.6 nm时, 水总体保持液态特征; 当受限尺寸减小至约1.6 nm时, 水分子扩散动力学被显著抑制, 氢键网络开始出现有序化特征; 当受限尺寸进一步减小至1 nm以下时, 水在室温下完全转变为晶体相(图1(b)); 在1~1.6 nm之间, 水处于液体和固体之间

引用格式: 张世辰, 赵正朴, 边珂, 等. 纳米受限水的相变与超润滑研究. 科学通报, 2026, 71: 5203–5205
Zhang S, Zhao Z, Bian K, et al. Phase transition and superlubricity of nanoconfined water (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 5203–5205, doi: 10.1360/CSB-2026-0516

© 2026《中国科学》杂志社

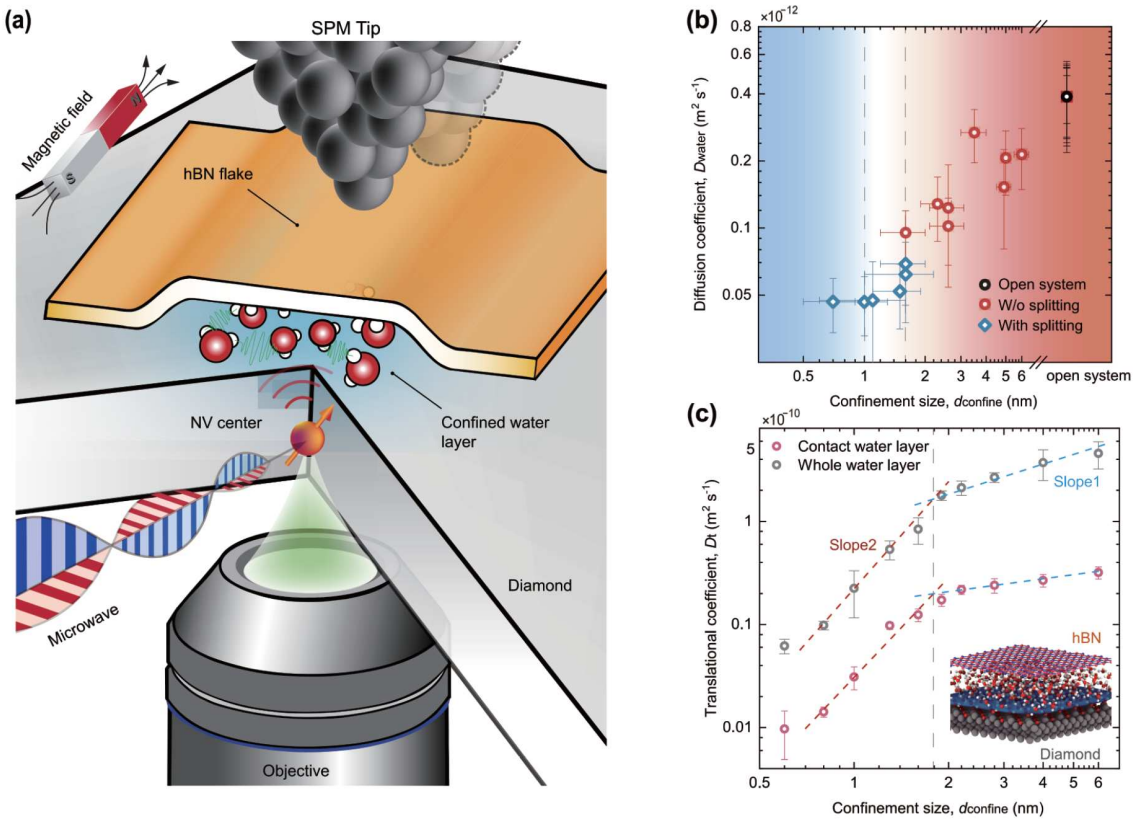

图 1 (网络版彩色)实验装置示意图及纳米受限水的液–固相变行为[2]. (a) 实验装置示意图; (b) 不同受限尺寸d_{confine}下水分子扩散系数D_{water}的实验结果; (c) 分子动力学(MD)模拟得到的水分子平移扩散系数D_{t}随受限尺寸d_{confine}的变化

Figure 1 (Color online) Experimental setup and liquid–solid phase transition of nanoconfined water[2]. (a) Schematic of the experimental setup. (b) Experimental results of the water diffusion coefficient D_{water} under different confinement sizes d_{confine}. (c) Translational diffusion coefficient D_{t} from molecular dynamics (MD) simulations as a function of confinement size d_{confine}

的“类固体”状态. 这一实验结果同样得到了理论支持(图1(c)).

上述工作表明, 室温条件下的二维纳米受限水并不是液体, 而是呈现出类似冰的结构(即二维冰). 为了揭示纳米受限水“超快传输”现象的微观起源, 我们采用自主研发的高分辨qPlus-AFM技术, 对二维冰的界面摩擦行为进行原子级表征[1] . 该技术基于高品质因子石英音叉, 通过电四极矩针尖探测微弱的短程高阶静电力, 可实现水分子的氢原子成像, 从而精确解析二维冰的原子结构与摩擦响应, 为理解其异常传输行为提供直接证据.

我们分别在石墨烯和六方氮化硼表面生长了二维冰, 借助qPlus-AFM发现其呈现出双层互锁的六方冰相(图2(a)和(b))[1]. 通过逐步改变AFM针尖高度, 我们能够同时成像二维冰的氢键网络与衬底的晶格, 从而分析两者的相互对应关系. 实验结果表明, 二维冰晶格与石墨烯晶格不公度, 即晶格常数和方向不完全匹配(图2(c)), 而二维冰晶格与氮化硼晶格是公度的, 一个水六元环对应一个硼-氮十四元环(图2(d)). 进一步的密度泛函理论分析表明, 两个体系公度性的差异起源于石墨烯和氮化硼不同的表面电性, 氮化硼表面的极性使得水分子在其表面的势能起伏比在非极性的石墨烯表面大2~3倍, 因而存在稳定的公度结构.

最后, 我们借助AFM针尖操纵实现了二维纳米冰岛在表面的可控滑移操纵以及原子级精度的摩擦力测量. 由于晶格的不公度, 二维冰在石墨烯表面上的单位面积摩擦力随二维冰总面积的增大而减小(图2(e)), 衰减系数约为−0.58, 符合超润滑的定量标准. 由于晶格的公度, 二维冰在氮化硼上的单位面积摩擦力为一恒定值, 符合传统的摩擦行为. 分子动力学(MD)模拟的结果与实验结果定量一致(图2(f)). 该结果为受限水输运的超润滑行为提供了首个实验证据.

该研究在分子层面描绘了纳米受限水液态-类固态-晶态的完整演化路径, 首次在实验上发现室温条件下的二维受限水具有类冰结构(二维冰). 此外, 我们发现二维冰在石墨烯表面表现出近乎无摩擦的超润滑输运特性. 该工作成功解决了纳米流体领域长期存在的关键争议, 系统揭示了纳米尺度下独特的液体结构, 为纳米受限水超快输运等反常特性的根源

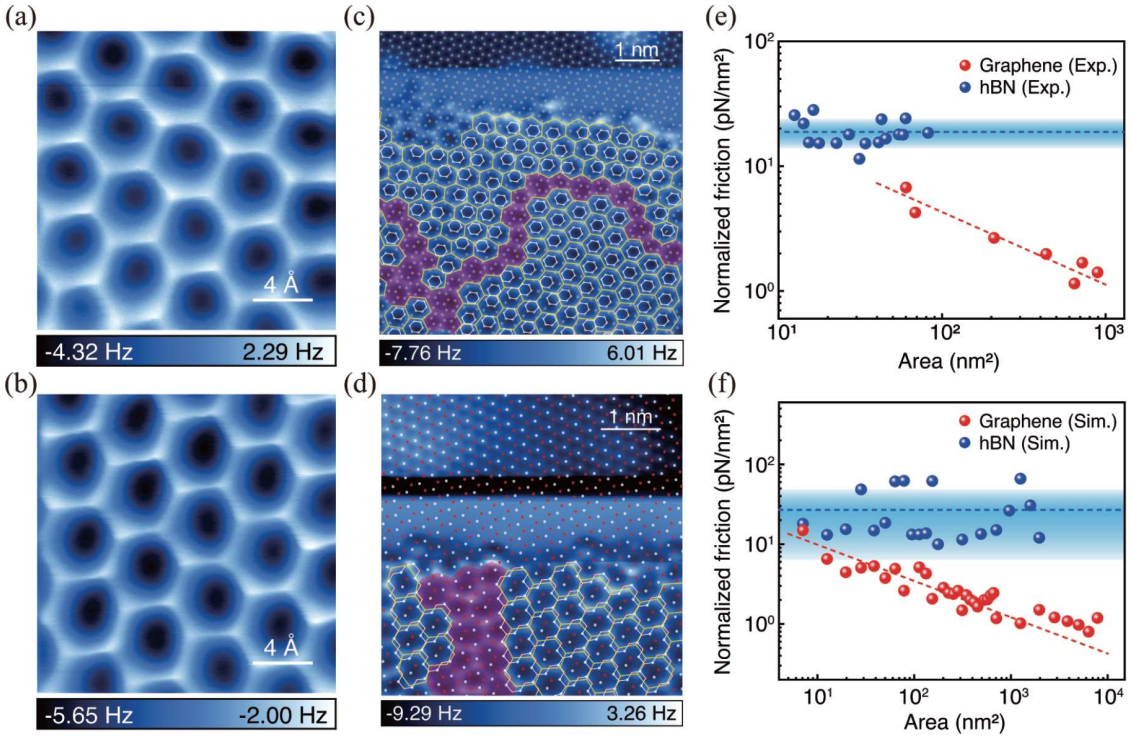

图 2 (网络版彩色)石墨烯和氮化硼表面二维冰结构和摩擦力测量[1]. (a), (b) 石墨烯(a)和氮化硼(b)表面二维冰的高分辨AFM成像. (c) 二维冰与石墨烯晶格的AFM结构成像, 黄线表示二维冰的水分子六元环, 白线表示石墨烯的碳六元环, 两者无对应关系. (d) 二维冰与氮化硼晶格的AFM结构成像, 其中二维冰的一个水分子六元环(黄线)与氮化硼的一个硼-氮十四元环(白线)一一对应. (e) 二维冰在表面滑移的面积归一化本征静摩擦力. (f) 分子动力学(MD)模拟得到的二维冰的面积归一化静摩擦力

Figure 2 (Color online) The structure and friction of 2D ice on graphene and hBN[1]. (a), (b) High–resolution AFM imaging of two–dimensional ice on the surfaces of graphene (a) and boron nitride (b). (c) Simultaneous structural AFM imaging of 2D ice and the graphene lattice. Yellow lines denote the water hexagons of 2D ice, and white lines denote the carbon hexagons of graphene, with no correspondence between them. (d) Simultaneous structural AFM imaging of 2D ice and the boron nitride lattice. One water hexagon of 2D ice (yellow line) matches well with one B–N 14–membered ring of boron nitride (white line). (e) Area–normalized intrinsic static friction for 2D ice sliding on the surface. (f) Area–normalized static friction force of 2D ice obtained from MD simulations

提供了统一的物理图像. 基于这些成果, 未来可将二维受限水实验方法扩展至复杂多孔材料或功能化纳米孔道, 研究不同孔道环境下水的相变与输运特性, 探索纳米受限水在盐差发电、低能耗海水淡化或水伏电池等方向的应用, 为高效能量转换与水资源利用提供变革性技术; 同时, 可进一步将NV色心–AFM技术应用于生物水体系的研究, 如蛋白质凝聚等生物过程中水分子的结构与动力学解析, 揭示水在生命活动中的关键角色.

推荐阅读文献

1 Wu D, Zhao Z, Lin B, et al. Probing structural superlubricity of two-dimensional water transport with atomic resolution. Science, 2024, 384: 1254–1259

2 Zheng W, Zhang S, Jiang J, et al. Experimental observation of liquid–solid transition of nanoconfined water at ambient temperature. Nat Mater, 2026, 25: 495–501

3 Zheng W, Bian K, Chen X, et al. Coherence enhancement of solid-state qubits by local manipulation of the electron spin bath. Nat Phys, 2022, 18: 1317–1323