

SEMINAR



SERIES

北京大学应用物理

与技术研究中心

高能量密度物理数值模拟教育部重点实验室

水界面自离子分布及其对界面物理化学过程的调控

报告人：许雪飞 副教授（清华大学能源与动力工程系）

报告内容：

水界面在自然科学和工程科学领域起着至关重要的作用。由于界面水呈现出不同于体相水的微观结构特征，水自发电离产生的水自离子，即氢氧根离子和水合氢离子，在水界面上的分布倾向与体相环境存在差异。水自离子在水界面的倾向性富集不仅影响水界面酸性，还可能通过改变电场而影响界面化学反应，甚至水自离子可能直接参与界面化学反应进而调控化学反应机制和动力学，以及影响界面相关的物理过程。然而，目前水界面的物理化学特性，尤其是水自离子的界面分布特性仍不明晰。对此，我们构建了可精确描述质子转移、界面化学反应过程的机器学习势能面、采用增强采样方法捕捉水自发电离等化学反应的稀有事件，对水自离子在不同水界面的分布特性进行了分子动力学的模拟研究，我们发现了水自离子在空气-水界面的双层分布倾向，揭示了该分布特性对体相氮气纳米气泡稳定性和水界面甘氨酸分子互变异构反应机制和动力学的影响机制。

报告人简介：

许雪飞，清华大学能源与动力工程系和燃烧能源中心长聘副教授。2001年和2006年分别获得厦门大学学士和博士学位，2006-2008年厦门大学讲师，2008-2010和2010-2015分别在以色列耶路撒冷希伯来大学和美国明尼苏达大学从事博士后研究，2015年加入清华大学能源与动力工程系担任副教授。主要从事清洁能源与高效储能相关的气相化学反应动力学、光化学和表界面反应的理论计算研究。

主持人：陈默涵 研究员（北京大学应用物理与技术研究中心）

时 间：2025年4月3日（周四）12:20

地 点：北京大学工学院1号楼210会议室

欢迎各位老师和同学参加交流与讨论