

科普微课系列

---

# 纳米小世界里的大侦探



-- 分子原子相互作用机制初探

赵丽娜 研究员

中国科学院高能物理研究所

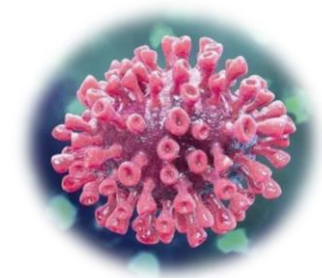
中国 北京 2020-05-08



# 浩渺大宇宙



# 纳米小世界



# 纳米小世界有多小？

**纳米是长度计量单位**，一米的十亿分之一( $10^{-9}$ 米)，  
万分之一头发粗细（人的头发直径约为**80-100微米**）。  
形象地讲，一纳米的物体放到乒乓球上，就像一个乒乓球放在地球上一般。

“**纳**” (nano)来自于希腊文，本意是“矮子”或“侏儒” (dwarf)的意思。

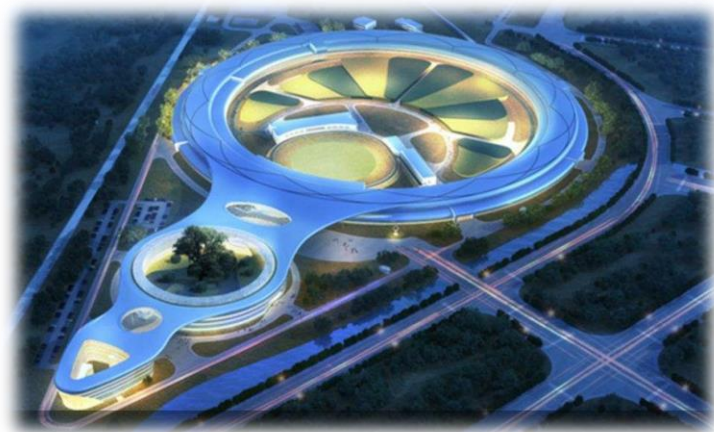
**纳米结构**：通常是指尺寸在**100纳米**以下（**1-100nm**）的微小结构。

# 观测纳米世界的超级显微镜

系列电子显微镜

X射线同步辐射装置

光学显微镜

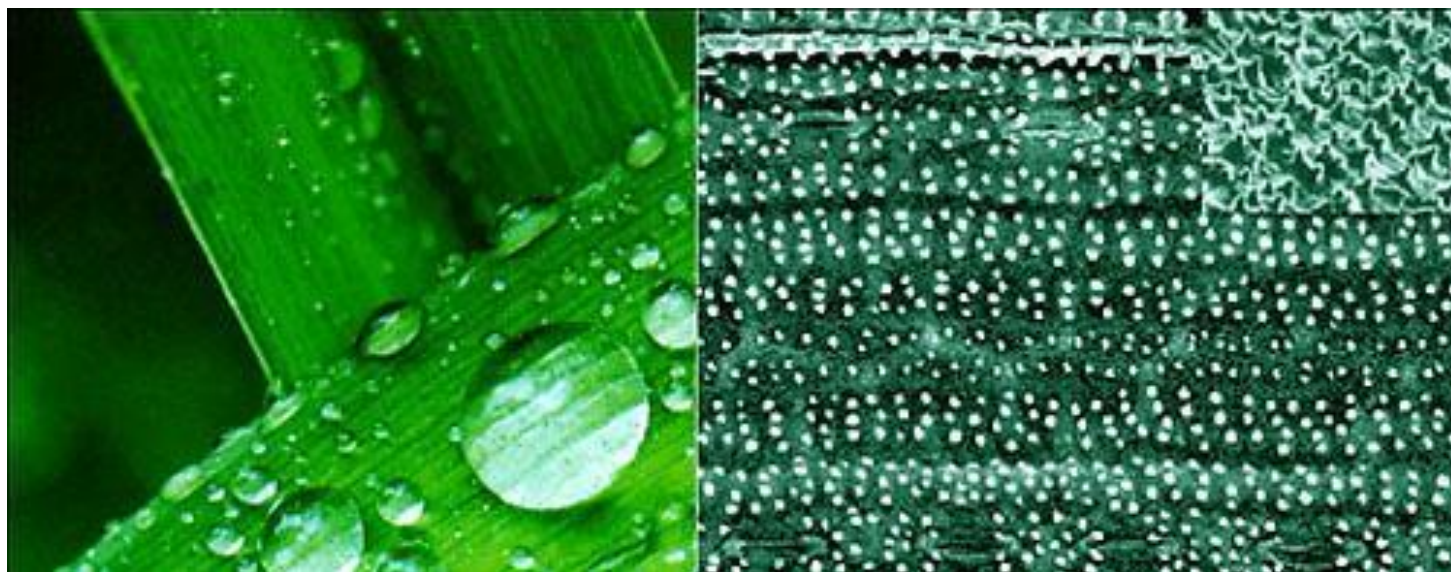


散裂中子源装置



# 大自然中的纳米世界

- 水稻叶



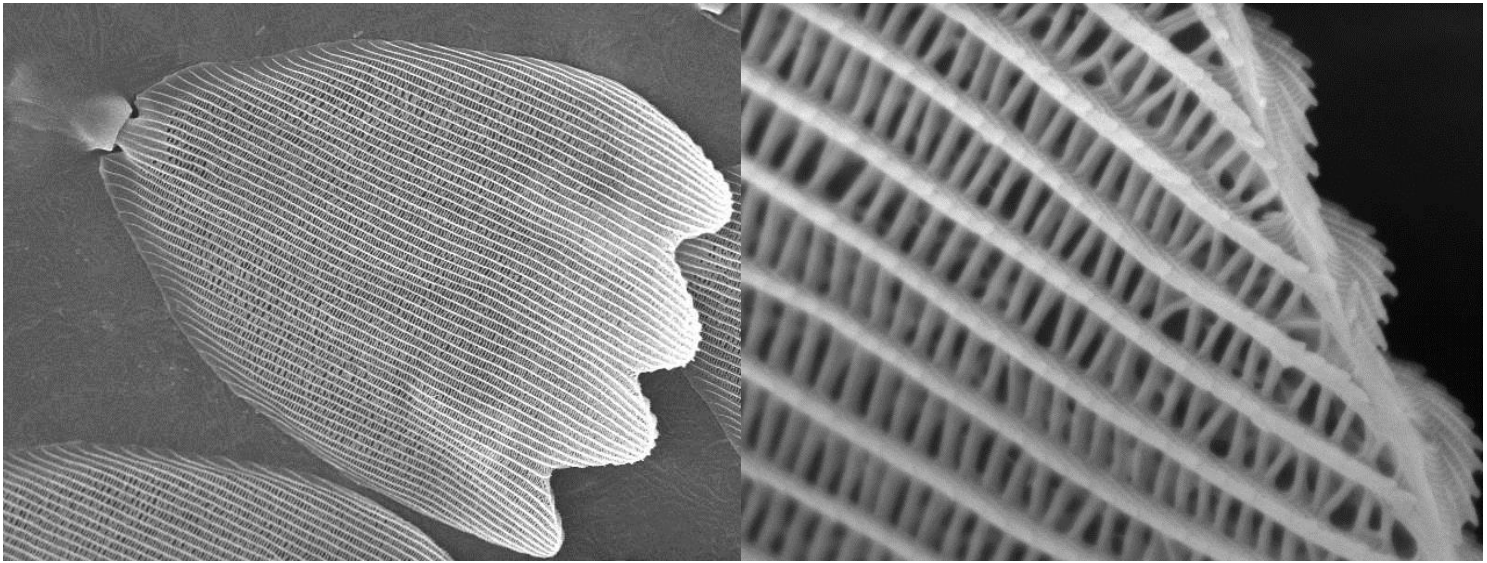
由于表面纳米级结构的取向排列，水滴在水稻叶表面会呈现各向异性的流动趋势。

左图为水滴在水稻叶表面的各向异性照片；右图为水稻叶表面的微观结构显微图像。

# 大自然中的纳米世界



- 蝴蝶翅膀

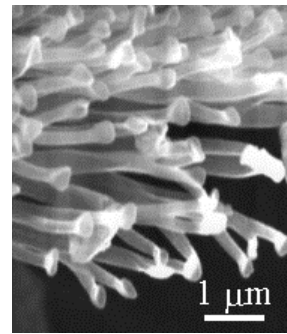
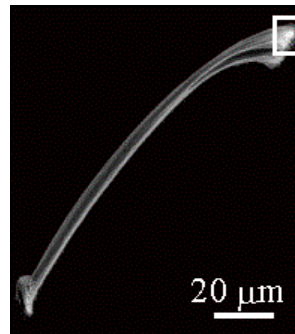
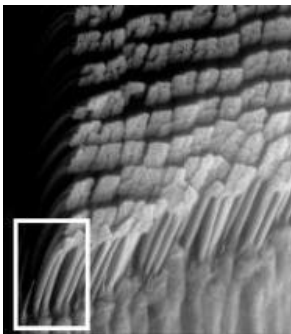
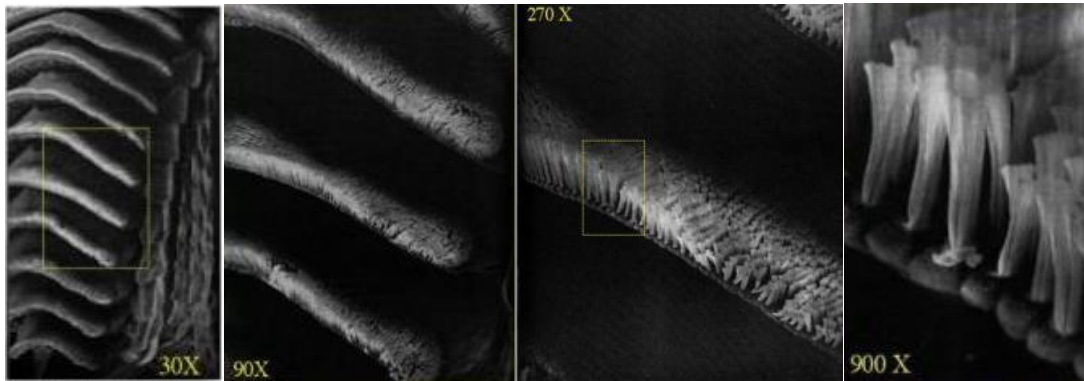
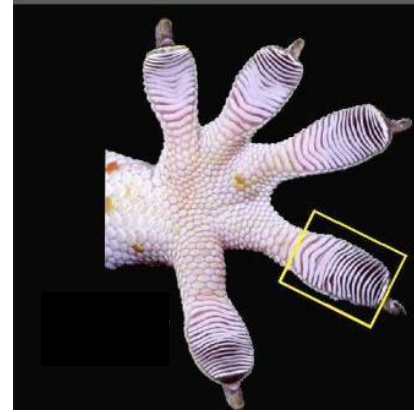


蝴蝶翅膀鳞片的显微图像。

左图为在较小放大倍数先看到的鳞片的纳米结构，看起来就像是屋檐上的瓦片；右图为在更高的放大倍数先看到的纳米结构。

# 大自然中的纳米世界

- 壁虎脚掌



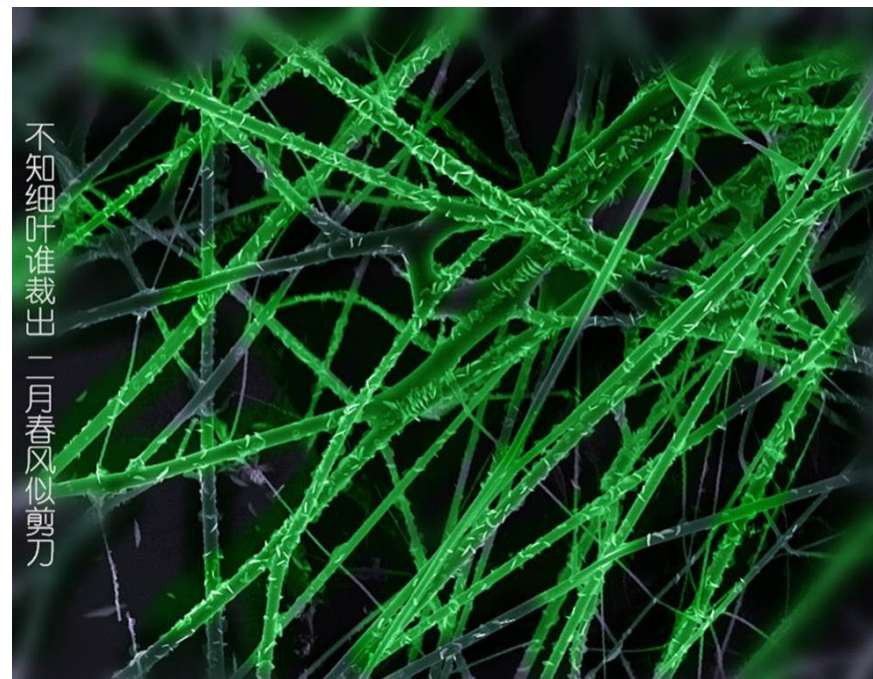
壁虎脚掌显微图像。

仿生纳米“蜘蛛侠”。

# 纳米世界里的“大自然”



海上扬帆：多层石墨烯膜，如同大海



不知细叶谁裁出二月春风似剪刀

春风：MoS<sub>2</sub>纤维



# 纳米世界里的“大自然”



风吹麦浪！碳纳米管阵列

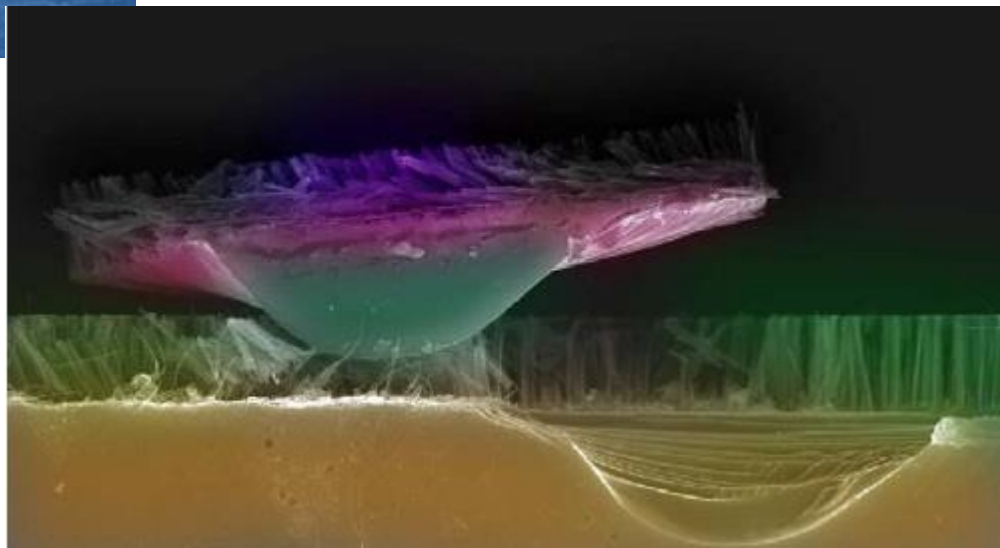


凤凰涅槃：石墨烯褶皱

# 纳米世界里的“大自然”



冲浪：石墨烯

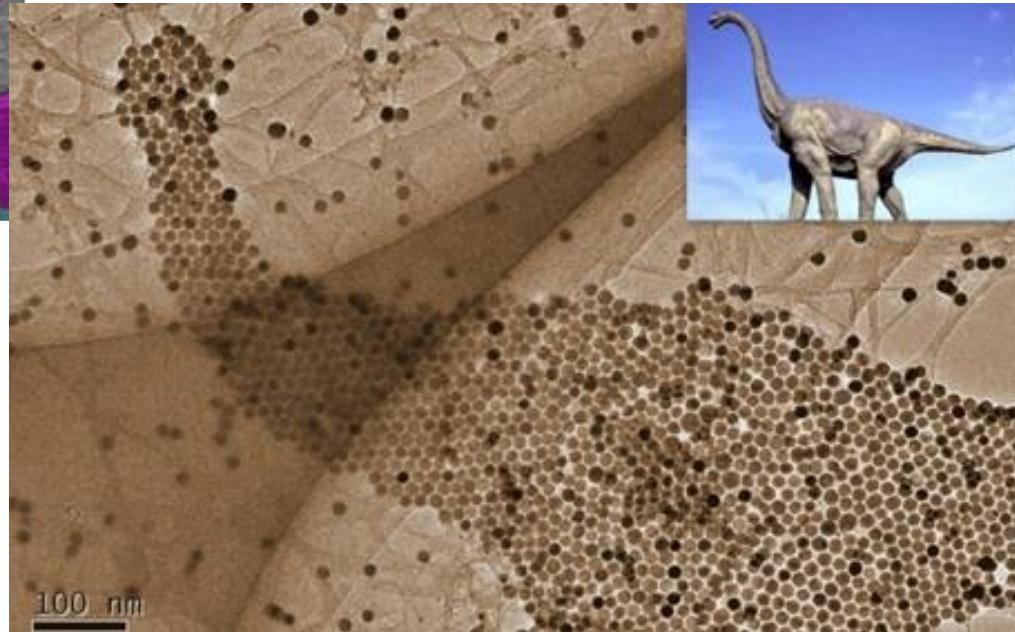


飞碟：碰裂的硅片

# 纳米世界里的“大自然”



老孙来也！碳管表面沉积聚吡咯



史前长颈龙：硫化银纳米颗粒 11

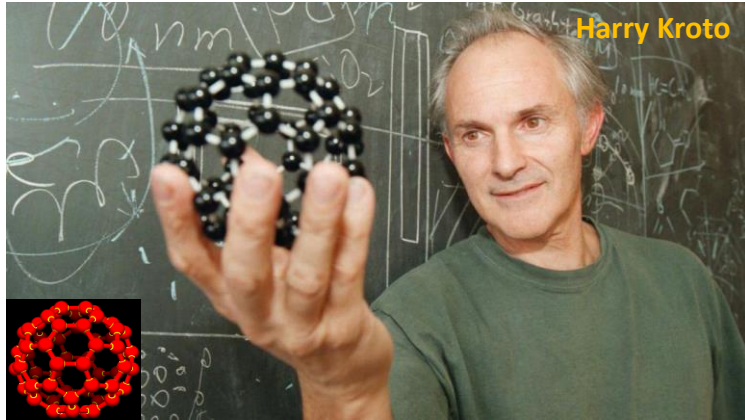
# 构成纳米世界的纳米材料

**纳米材料**是指在三维空间中至少有一维处于纳米尺度范围或由它们作为基本单元构成的材料。

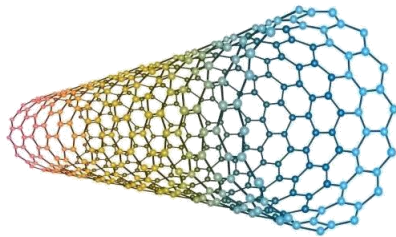
如果**按维数**，纳米材料的**基本单元**可以分为三类：

- (1) **零维**，指在空间三维尺度均在纳米尺度，如纳米尺度颗粒、原子团簇等；
- (2) **一维**，指在空间有两维处于纳米尺度，如纳米丝、纳米棒、纳米管、纳米带等；
- (3) **二维**，指在三维空间中有一维在纳米尺度，如超薄膜、多层膜、超晶格等。

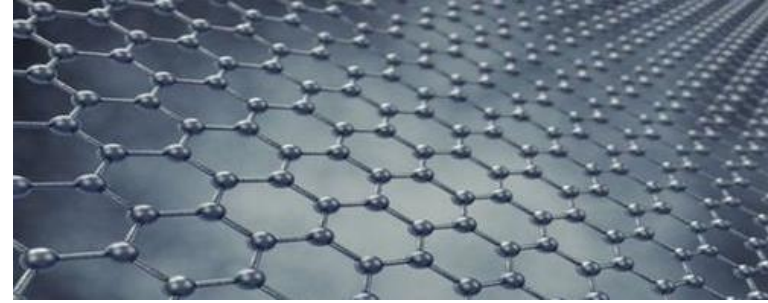
# 纳米材料的分子结构



1985年，克罗托、科尔和斯莫利发现**富勒烯**，并于1996年一同获得诺贝尔化学奖。  
([零维](#))



1991年，饭岛澄男发现**碳纳米管**。(一维)



2006年，盖姆和诺沃谢夫开展**石墨烯**开拓研究，并于2010年一同获得诺贝尔物理学奖。  
([二维](#))

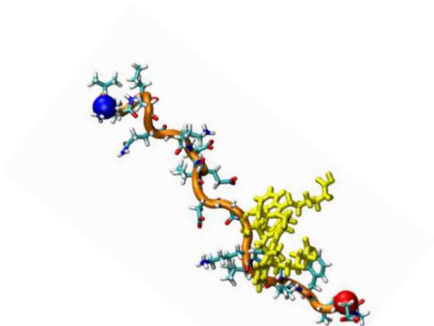
# 分子原子相互作用机制



在超级显微术的基础上，根据分子原子行为规律构建纳米体系模型，利用**多尺度分子模拟方法**在计算机上做实验，揭示分子原子相互作用机制，成为纳米世界的**大侦探**！

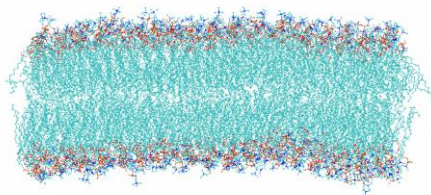
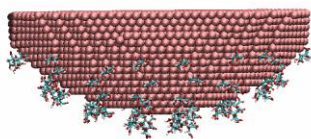
## 分子细节

突破空间极限(nm)



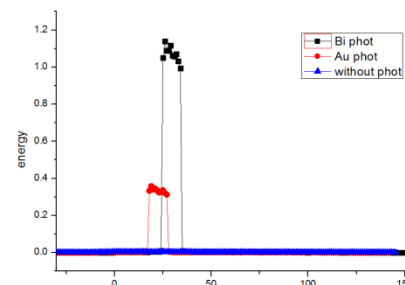
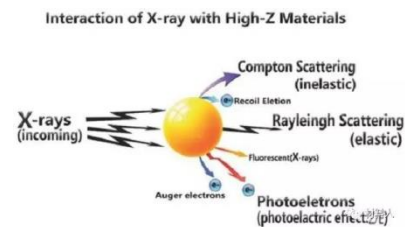
## 动力学过程

突破时间极限(ns)



## 分子机制

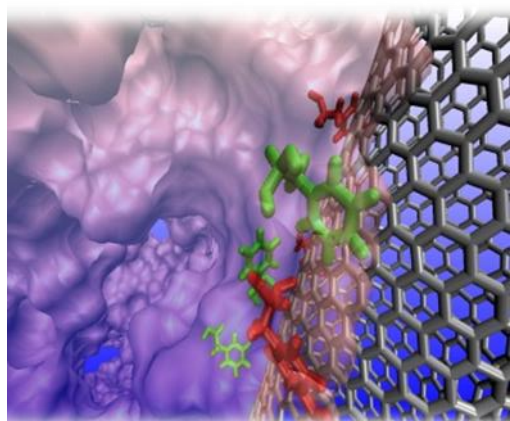
定性→定量



# 多尺度分子模拟计算方法

分子模拟计算

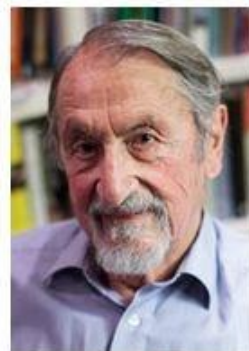
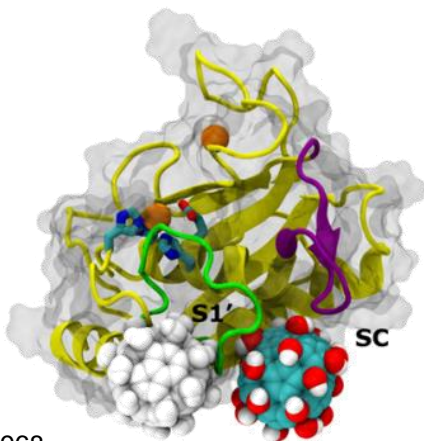
利用理论与计算方法，模拟分子运动的微观行为的方法。



*Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2011, 108, 16968.

*Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2012, 109, 15431.

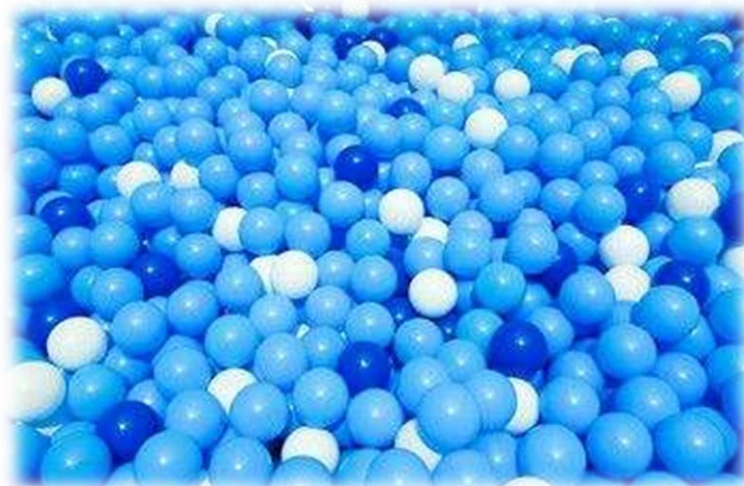
纳米材料与生物大分子相互作用模型。



卡普拉斯、莱维特和瓦谢勒因多尺度模拟方法贡献，一同获得2013年诺贝尔化学奖。

# 1 经典分子动力学方法

牛顿力学



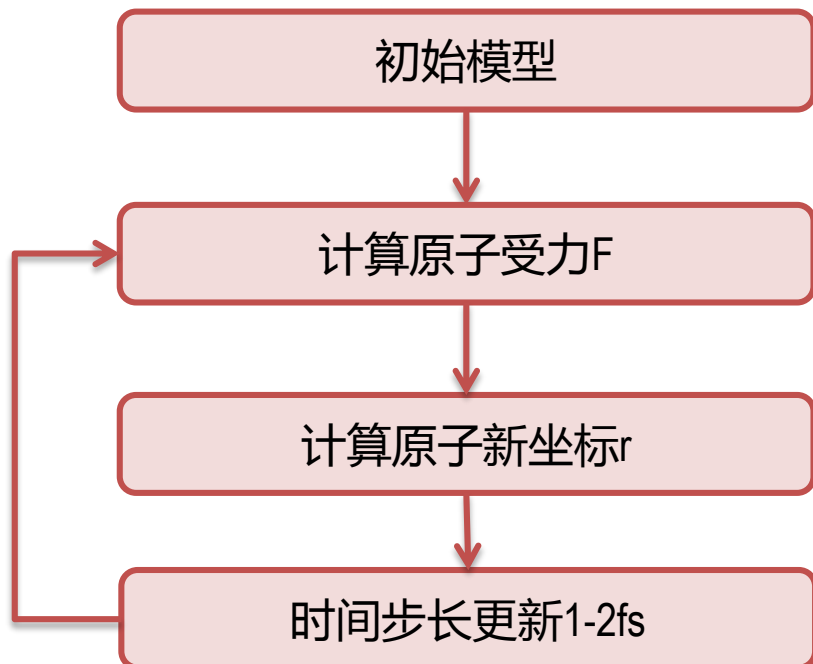
**基本原理：**在每一时刻针对每个原子求解牛顿力学方程，求得原子的受力，通过原子的加速度确定原子坐标，研究原子、分子间相互作用关系。

$$F = ma$$

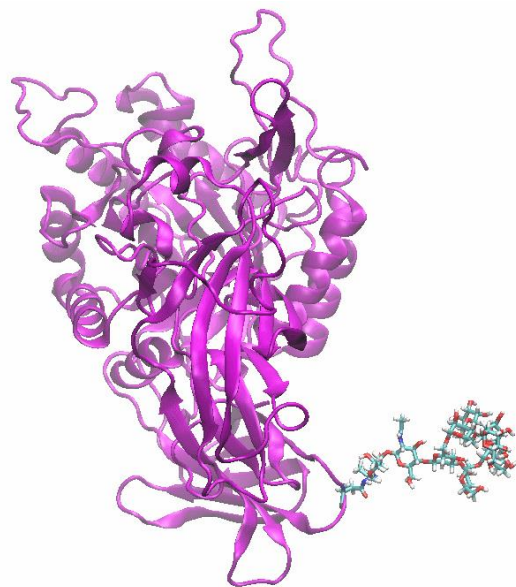


# 1 经典分子动力学方法

计算流程：



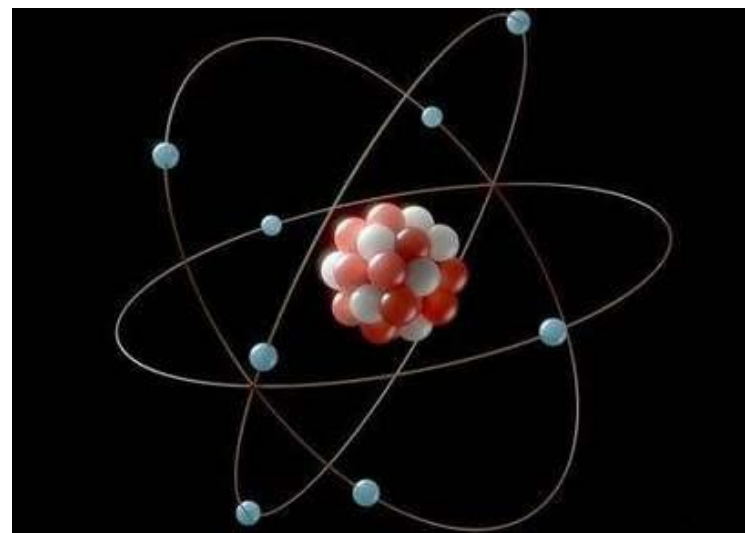
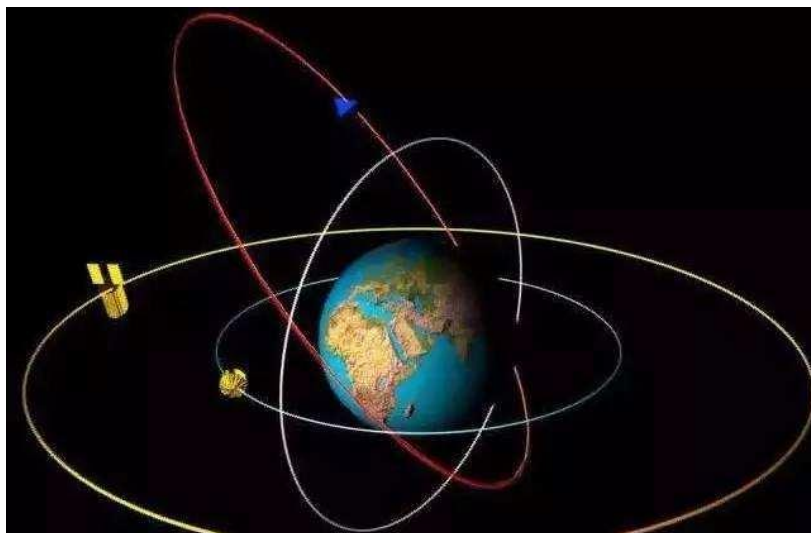
动力学电影：



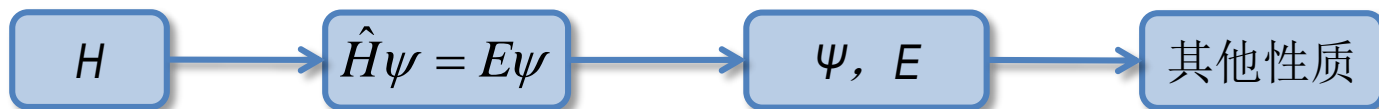
物理过程  
新机制

# 2 密度泛函理论方法

等量代换

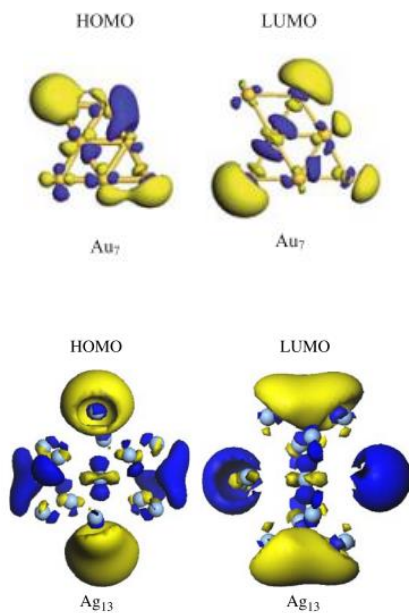


基本原理：基于**电子尺度**，运用**量子力学**原理求解薛定谔方程。（**电子密度**取代波函数作为研究的基本量）



# 2 密度泛函理论方法

电子结构信息：



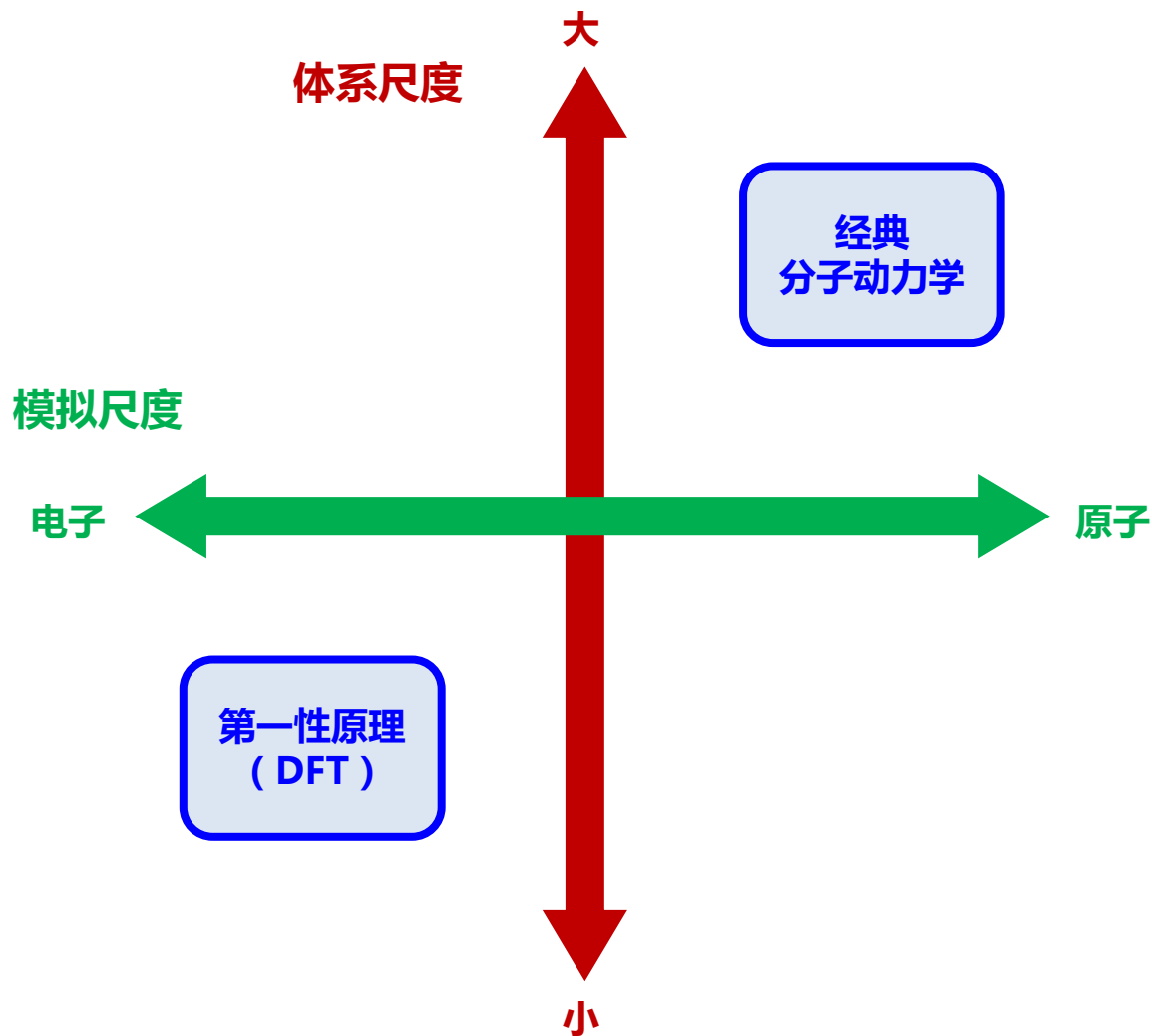
*Small*, 2013, 9, 3506.  
*Nanoscale*, 2011, 3, 4824.



化学过程

新材料

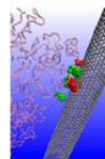
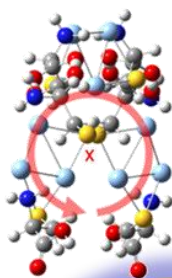
# 多尺度分子模拟计算**法宝套装**



# 揭示分子原子相互作用机制

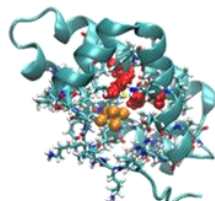
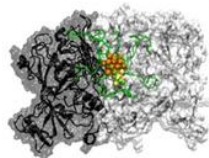


*Small*, 11, 5118-5125, 2015

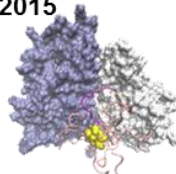


*Small*, 9, 3506-3513, 2013

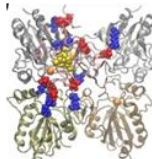
*Nanoscale*, 8, 11454-11460, 2016



*ACS Nano*, 9, 4976-4986, 2015



*Nanoscale*, 8, 4203-4208, 2016



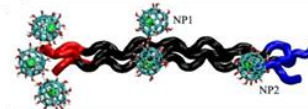
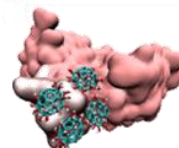
*Sci. Rep.*, 7, 131, 2017

*J. Phys. Chem. Lett.*, 9, 4638-4645, 2018

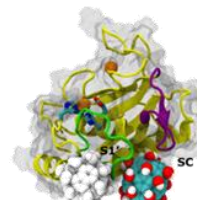
贵金属

碳基

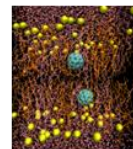
*J. Biomed. Nanotechnol.*, 12, 1234-1244, 2016



*Nanoscale*, 5, 7341-7348, 2013

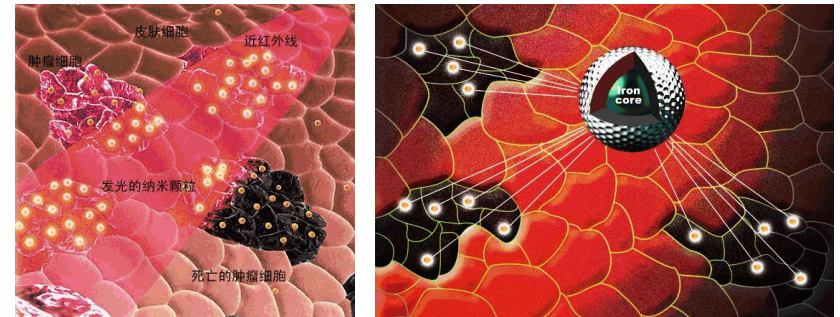
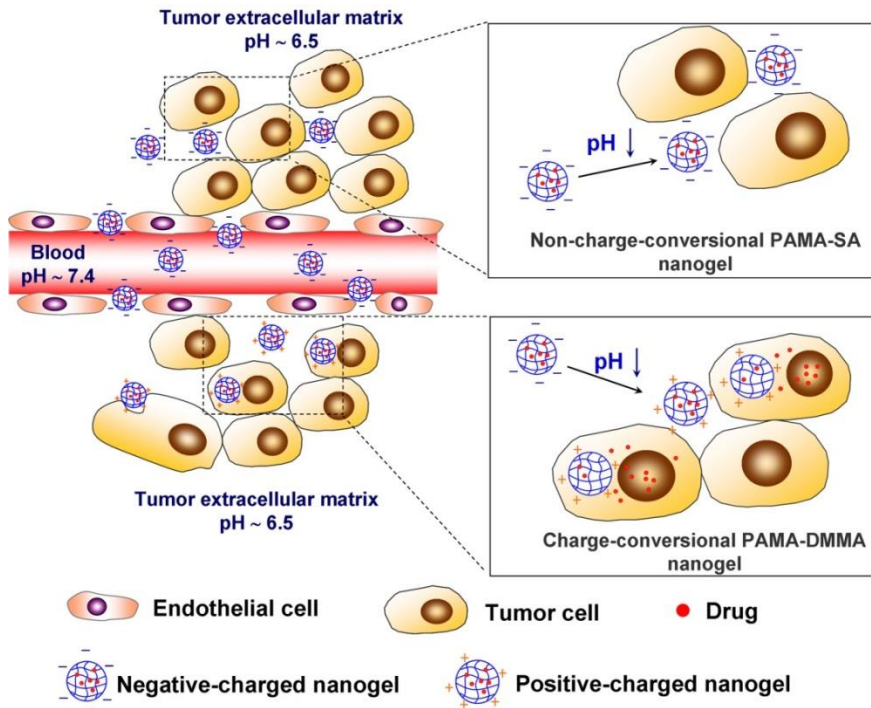


*PNAS*, 109, 15431-15436, 2012



*Biomaterials*, 32, 4030-4041, 2011

# 大侦探变身药学家

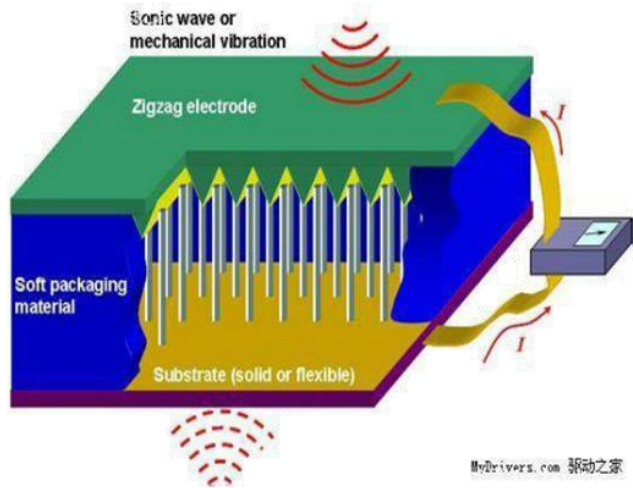


抗癌纳米药物在人体内的作用过程

纳米颗粒用于肿瘤杀伤或者成像

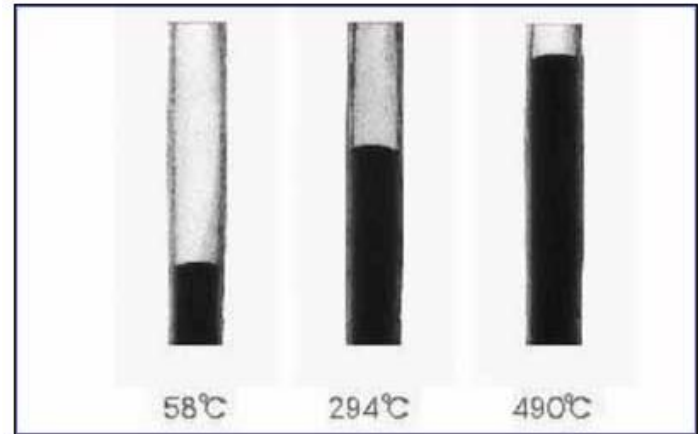
# 大侦探变身发明家

- 纳米发电机



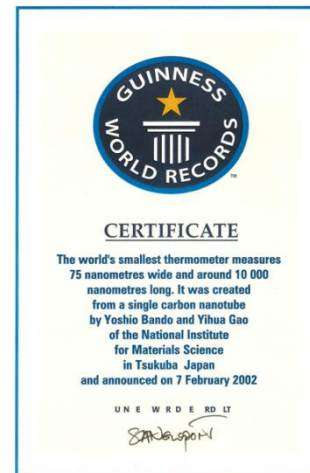
MyDrivers.com 驱动之家

- 纳米温度计



世界上最小的  
发电机

王中林院士  
Science 2007



世界上最小的  
温度计

吉尼斯世界纪录  
Nature 2002

# 如何升级为超级大侦探



人工智能技术  
自动提取特征向量  
挖掘数据内在相关性

???? 技术  
%#%#%#

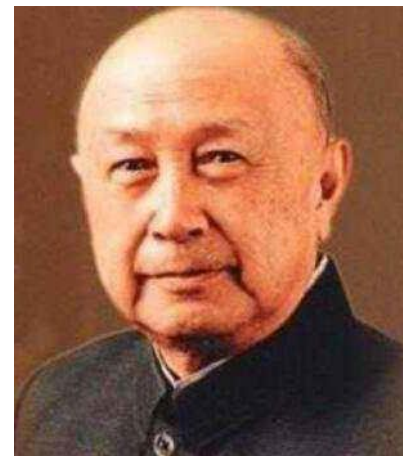



# 纳米科技发展前景

著名物理学家**费曼**在1959年的《在底部还有很大空间》演讲中，预言人类操纵分子原子可能发生的奇迹，提出纳米技术的最早动意与梦想。



著名科学家**钱学森**预言：纳米和纳米以下的结构是下一阶段科技发展的一个重点，会是一次技术革命，从而将是21世纪又一次产业革命。





海阔凭鱼跃，天高任鸟飞。

奋斗吧~少年！