淡江時報 第 1220 期

**探討水與氣體分子交互作用 李啟正研究成果登上《Small Structures》**

**學習新視界**

【記者陳宇暄淡水校園報導】物理系副教授李啟正與中研院及臺大學者共同發表「Crystalline Water Structure in Room-Temperature Clathrate State：Hydrogen-Bonded Pentagonal Rings（室溫下籠形水合物的結晶水結構：氫鍵形成的五邊形環）」，刊登於知名國際期刊《Small Structures》，影響因子高達13.9，為材料期刊中最難發表期刊之一，文章不接受率高達五成六，論文內容皆具備前瞻性和完整性，才能被接受並發表。

　李啟正表示，在常壓室溫時條件下，水通常為液態或低溫下的冰，液態無週期性，冰則多為六方晶系結構，傳統上認為，在室溫與常壓條件下，水分子難以形成具明確原子排列位置的晶體結構。他與中央研究院研究員黃英碩，博士陳敬修與徐偉豪和臺灣大學教授朱明文一同研究，使用穿透式電子顯微鏡發現，即使在室溫與常壓下，水被石墨烯包覆時，亦可形成具有週期性的晶體結構，觀察到水分子形成籠狀結構，能包覆氣體分子。

　李啟正再與日本九州大學教授富安亮子合作，利用實驗得到的電子繞射數據，成功解析出常溫常壓下，具有晶體結構的水所對應之晶格常數，並進一步運用第一原理理論計算，與團隊建構出「籠形水合物」中水分子的晶體結構。結果顯示，這些水分子形成了五角環形式鍵結圖像，與已知的冰相 XVII高度相似。不僅展示水在室溫常壓與受包覆的環境下，具備結晶能力，也探討了水與氣體分子間的交互作用，對室溫下水的微觀結構，提供了重要線索。





