

中国科学技术大学优秀博士学位论文推荐表

作者姓名	朱银波	学号	BA15005014	出生年月	1991.3	民族	汉
院系名称	近代力学系	电话	13855168794	毕业去向	中国科学技术大学博士后		
指导教师	吴恒安		获博士学位日期		本次申请		
一级学科名称	力学		二级学科名称		固体力学		
本科毕业院校	华北水利水电大学		硕士毕业院校		硕博连读		
承担主要社会工作		无					
获奖情况	2017年, 博士后创新人才支持计划						
	2017年, 中国科学院院长奖						
	2016年, 博士研究生国家奖学金						
	2016年, 中国科学技术大学春季学期优秀助教						
	2016年, WCCM XII & APCOM VI 国际会议 Student Travel Award						
	2015年, 中科院材料力学行为和设计重点实验室年会金奖						
	2014年, 第十一届华为杯全国研究生数学建模竞赛三等奖						
学位论文题目		石墨烯纳米通道内二维受限水的相态与相变					
学位论文研究方向		微纳米力学					
学位论文评阅专家		冯西桥	段慧玲	魏宇杰	郭万林	王秀喜	
学位论文答辩专家		冯西桥	伍小平	王秀喜	何陵辉	龚兴龙	倪勇 姜洪源
论文答辩日期		2017年5月26日		论文答辩结果(通过票数/不通过票数)			7/0
学位论文中文摘要							
<p>水是地球上最常见也是最普通的物质之一, 被誉为是生命之源。地球上的水绝大部分是以体相水的形式存在, 主要为气态、液态和固态(冰)。然而水却更多地以界面或受限水的形式参与各种物理、化学和生物过程, 因此研究微纳米结构中受限水的成键构型、物理化学性质以及流动行为等, 进而面向材料科学、水资源、环境和能源利用等领域的实际需求系统地开展受限水的应用研究, 成为当前水科学研究的重要领域和国际前沿热点。</p> <p>近年来, 石墨烯以其独特的力学、电磁学与物理等特性而备受关注。氧化石墨烯薄膜不同寻常的渗透行为和离子海绵效应不仅使得其在海水淡化和物质运输等领域具有广阔的应用前景, 而且相应的机理研究也是学术界关注的前沿科学问题。实验和模拟发现, 氧化石墨烯薄膜的限域效应使得水分子能够进入间隙只有0.35纳米左右的石墨烯纳米通道中, 而且自发形成二维的晶体状类固体结构。Algara-Siller等在实验中观察到纳米水滴在两片石墨烯之间形成单层方形冰, 这种二维方形结构是常温下水的一种全新存在形式, 突破了长久以来人们对冰的已有认识。模拟表明这种特殊的晶体相主要是由于石墨烯受限空间内高达GPa量级的van der Waals压强(类毛细压)作用, 即纳尺度限域效应。纳尺度限域效应会明显影响受限水的结构形态、动力学行为以及热力学特性等, 相关的内在机理还未得到全面的认识。从力学的角度来看, 水在两片石墨烯之间由液态到固态的相变具有二维液体的亚稳态极限(压缩极限)的特征。基于此, 本文通过经典分子动力学模拟研究二维受限水在石墨烯纳米通道内的相态和相变。第一次系统地研究了二维受限水的压缩稳定极限, 发现多种新的二维冰相和相变过程, 首次得到了侧向压强作用下二维材料的压缩极限相图, 同时发现了侧向压强主导的两阶段过热熔化现象。</p> <p>本文首先研究了两片石墨烯包裹形成的单层方形冰, 从结构特征与动力学特性的角度来揭示两片石墨烯包裹的单层方形冰的形成, 用统计平均的方法证明单层方形冰固有的方形特征。根据单元特点对模拟中得到的单层方形冰的结构给出定义, 具体分析了有限温度作用下单层方形冰中水分子自发翻转行为和翻转引发的结构演化, 结合几何平均和时间平均概念, 使用统计平均的方法研究单层方形冰的方形特征。随后, 本文对石墨烯纳米通道内二维受限水的压缩相变和过热熔化相变进行了详细的研究。分子动力学模拟研究发现, 在不同的纳米通道宽度或温度条件下, 侧向压强作为一个可控因素, 能够实现二维受限水的一阶相变和连续型相变, 得到新的不同结构的冰相。</p> <p>在模拟中共观察到12种不同的二维冰相, 分别是: 平的单层方形冰(fMSI)、之字形褶皱的单层方形冰(pMSI)、单层三角形非晶态冰(ML-T)、AB堆垛结构双层方形冰(BL-ABI)、AB堆垛结构双层方形非晶态冰(BL-AB₂)、AB堆垛结构双层菱形冰(BL-AB₁)、AA堆垛结构双层正六边形冰(BL-ice I)、AA堆垛结构双层方形管状冰(BL-VHDI)、AA堆垛结构双层三角形冰(BL-AAI)、ABA堆垛结构三层</p>							

方形冰 (TL-ABAI)、ABA 堆垛结构三层菱形冰 (TL-ABA) 和 AAA 堆垛结构三层三角形冰 (TL-AAAI)。根据一系列的热力学平衡状态和 Clapeyron 方程, 在通道宽度-侧向压强 (h - P) 平面内得到了二维受限水的压缩极限相图, 压缩极限曲线具有多个局部极大值。从双层液态水到 BL-VHDI 和 BL-AAI 的相变分别是一阶相变和连续型相变, 这两种不同相变的温度阈值是~275 K。从 BL-VHDI 到 BL-AAI 的结构转变可以看作是方形冰纳米管的屈曲失稳。ABA 堆垛结构的三层冰结构类似于双层笼形水合物, 其中间层水分子被当作客体分子。对于 AAA 堆垛结构的三层冰, 与石墨烯壁面相邻的两层水分子比中间层的扩散更快。在单层方形冰的过热融化过程中, 共有四种不同的融化相变情形, 其中在较高的侧向压强条件下, 发现两种不同的两阶段融化现象以及单层冰和液相的共存状态, 并给出了单层方形冰的与侧向压强相关的过热融化相图。

“What is the structure of water”是 *Science* 杂志公布的 125 个最具挑战性的科学前沿问题之一。研究受限水的相态行为是水科学研究领域的重要分支, 对受限水的物质形态、固液界面多种物理机制耦合以及纳米尺度限域传质等基础科学研究和海水淡化、物质运输、生物科学、材料科学以及传统产业转型升级等实际应用需求具有重要的学术价值。

攻读博士期间与博士学位论文相关的代表性成果 (限列 10 项)

发表学术论文数	13	本人第一论文数 (含导师第一本人第二)	6	专利及其它成果数	0
序号	成果名称	作者排名	期刊名称	发表时间	收录情况
1	Compression limit of two-dimensional water constrained in graphene nanocapillaries	1	ACS Nano	2015	SCI 一区 IF: 13.334
2	Super-elastic and fatigue resistant carbon material with lamellar multi-arch microstructure	2 共同一作	Nature Communications	2016	SCI 一区 IF: 11.329
3	Formation of Trilayer Ices in Graphene Nanocapillaries under High Lateral Pressure	1	Journal of Physical Chemistry C	2016	SCI 二区 IF: 4.509
4	Buckling failure of square ice-nanotube arrays constrained in graphene nanocapillaries	1	Journal of Chemical Physics	2016	SCI 二区 IF: 2.894
5	AB-stacked square-like bilayer ice in graphene nanocapillaries	1	Physical Chemistry Chemical Physics	2016	SCI 二区 IF: 4.449
6	Superheating of monolayer ice in graphene nanocapillaries	1	Journal of Chemical Physics	2017	SCI 二区 IF: 2.894
7	Super-elasticity and deformation mechanism of three-dimensional pillared graphene network structures	2 通讯作者	Carbon	2017	SCI 一区 IF: 6.198
8	Multiscale transport mechanism of shale gas in micro/nano-pores	3 通讯作者	International Journal of Heat and Mass Transfer	2017	SCI 二区 IF: 2.857
9	Effect of grain boundaries on mechanical transverse wave propagations in graphene	2 通讯作者	Journal of Applied Physics	2017	SCI 三区 IF: 2.101
10	Joule-heated graphene-wrapped sponge enables fast clean-up of viscous crude-oil spill	6	Nature Nanotechnology	2017	SCI 一区 IF: 35.267