

溶液结构研究发展策略浅议

房春晖, 房 艳

(中国科学院青海盐湖研究所, 青海 西宁 810008)

摘 要: 溶液结构被定义为研究溶液中溶剂化物种的微观结构及其与宏观性质之间关系的科学。简单叙述了其研究对象和研究方法, 详尽阐述了其科学意义, 介绍了其研究现状以及主要进展, 并讨论了其研究策略。

关键词: 溶液结构; X射线衍射; 同步辐射; 多原子离子; 水溶液; 发展策略

中图分类号: O645 文献标识码: A 文章编号: 1008—858X(2006)03—0052—06

1 溶液结构概观

溶液结构是研究溶液中溶剂化物种的微观结构及其与宏观性质之间关系的科学。隶属于化学科学中的4级学科, 与电解质溶液化学、相平衡、分子动态学等并列。电解质溶液、离子溶液、非水溶液都是溶液结构研究的主要对象。而我们仅对海洋、盐湖、地下卤水等天然水, 以及运输营养和痕量元素给生命的生物水感兴趣。上述水除了组份和组成差异外, 其本质上都属于多组份电解质溶液。由于研究对象非常复杂, 人们习惯于从复杂体系抽象出简单体系进行研究。溶液结构实验研究方法大多属于物理学范畴。

水分子结构是非常简单的。但是与大多数分子液体比较, 液体水中氢键内和氢键外涨落, 戏剧性地改变了水分子的扭曲度。加入不同性质离子时, 进一步使水合层发生不同程度畸变^[4, 28]。溶液中分子或离子之间相互作用包含各种化学键和分子间力, 如对生命至关重要的氢键。液体运动也是多层次的, 如流动、热运动、振动、转动等等。水溶液涉及到的时间尺度从千秒(ks)起, 连续分布到毫秒(ms)、微秒

(us)、纤秒(ns, 10^{-9} s)、沙秒(ps, 10^{-12} s)、尘秒(fs, 10^{-15} s)和渺秒(as, 10^{-18} s)。上世纪80年代有人把水溶液结构分为3大类: 弥散结构(D-structure)、振动结构(V-structure)和瞬时结构(I-structure)。随后又出现了隐藏结构(H-structure)、局部结构(L-structure)、冻结结构(F-structure)、固有结构(Inherent structure)、时间分辨结构等。其中人们最感兴趣的是唯一能够直接获得液体中原子间距、配位数和夹角的所谓弥散结构, 也称为时间空间平均结构。其它一般是强调液体结构的不同侧面或者不同层次。正是由于水溶液结构的多层次性和多样性, 苏联维尔纳茨基院士指出:“水化学中所研究的现象如此复杂, 以致于它们在科学发展的每一个时代里都超出与它同时代的物理学和化学的范围以外。今后也是这样。”

现代物理学对液体结构的兴趣远远超过了化学^[1]。1990年以研究液体结构为核心内容的液态物理国际学术会议第一次在欧洲召开, 之后每3年举行一次会议, 足以说明物理学对液体结构的关注和兴趣。发达国家相继将液体结构列为本国重点研究领域, 同时确定为21世纪研究目标之一。我国1998年以后国家基金委也将液体结构列为物理科学优先研究领域。

收稿日期: 2005—06—14

作者简介: 房春晖(1958—), 男, 研究员, 主要从事溶液化学研究。

最近徐光宪等人提出 21 世纪 4 大化学难题之二就是“结构和性质的定量关系”。在化学发展史上, 人们历来高度重视结构与性质的关系, 但迄今为止人们的认识大多仍然是定性的或者模糊的, 象 Born 晶格能公式那样的惊人奇迹是罕见的。对于结构本身并不十分确定的液体来说, 溶液结构与性质定量关系更具有挑战性。

2 科学意义

液体结构是一个非常广阔的极具知识创新价值的研究领域。气体分子运动是完全随机的; 晶体周期性有序结构, 经近百年理论和实验研究已趋向成熟; 唯独物质三态之一——液体短程有序结构研究亟待进一步发展。值得注意的是, 液体结构不仅具有丰富新颖的物理图象, 而且在技术上和工业上具有巨大应用潜力。然而人们对晶体结构研究非常透彻, 但对孕育这些晶体的母液结构长期以来被忽视, 以致于母液结构成了现代科学的死角。过饱和溶液介于平衡溶液和水合晶体熔盐之间, 过饱和度是结晶过程的推动力, 其结构是晶体生长的关键环节。由于液体大多都和分子间力关系最为密切, 因而其结构在时间和空间的不同层次上呈现多形态多层次性。如水分子形成的超分子或者分子簇, 目前计算机模拟发现自组装固态超分子有 10 个水分子^[2]。除了水分子多聚体外, 计算机模拟发现了多圆环, 如三圆环、四圆环、五圆环和六圆环, 环中间是空穴, 其中六圆环在冰 II 晶体中大量存在。五、七配位数在晶体中属于凤毛麟角, 而五配位物种在溶液里却是司空见惯的。例如配位数精确为 5 的水合离子 $F(H_2O)_5^{2-}$ ^[3,4], $Cu(H_2O)_5^{2+}$ ^[5] 以及为数众多的过渡态水合离子片段(也称为簇)。

水始终是贯穿于自然科学、工程技术、农业科学和医药科学研究的一根主线。水结构决定了水的性质。水能有效传递和储存能量。水不仅是地球生命的液体, 而且是具有卓越溶解能力的溶剂。世界上任何物质如超导和纳米材料的重要性都不能与水相提并论。没有阳光可以有生命, 没有空气也可以有生命(如厌氧菌), 而

没有水便不会有生命。由于结构和性质特异, 水是为数很少的能够跨部门、跨领域、跨学科甚至跨星际的物质。不管是占我们这个行星表面 71% 天然水, 还是占生命体大部分的体液, 事实上都是组份和组成各异的水溶液。新近人们从火星上发现的水合硫酸镁^[6] 和碳酸盐等^{7-11]} 间接推断火星曾经存在火星海洋。水—水相互作用和离子—水相互作用在地球大气圈平衡、水圈平衡、岩石圈平衡、以及生物圈和生态圈平衡中扮演十分重要的角色。其中碳酸根和碳酸氢根离子与水的相互作用还涉及到温室效应以及大气污染的治理, 更重要是生命体的新陈代谢(代谢水)。水氢键结构与人类健康和长寿甚至焕发青春密切相关。尽管人们对冰、雪水、冰川水、磁化水的健康机制存在争议, 但氢键的重要性不容忽视。水和水溶液的结构, 直接关系到目前一些前沿难题的攻关, 人们期待从分子和离子的基本结构这个根本上揭示环境科学、生命科学和化学化工问题。如 SO₃ 等酸雨的形成过程中小水滴的形成机理; 厌氯作物中硫酸盐与水分子的相互作用; 海水和盐湖卤水中盐类矿物的分离; 硫酸盐过饱和溶液的形成本质; 利用介稳相图和过饱和现象分离盐类矿物; 某些盐类结晶加工过程的人为控制; 寻找光/电解制备氢的合适催化剂; 锅炉除垢和输卤管道结盐处理等等。毫无疑问, 这些知识的创新往往孕育着某些高新技术发明的机会。

液体结构的研究, 几乎使用了当代最先进的实验手段。IR 和 Raman 光谱是研究离子对形态的有效方法, 但并不能给出直接的结构信息。中子衍射法提供溶液中水局部结构, 但是测量不同径向分布函数的合适同位素却非常有限。EXAFS 可探测离子附近的局部结构信息, 但由于该法被限制到原子的周围环境。被测元素一般限制在元素周期表 21 号元素以后。角分辨光子发射扩展精细结构(ARPEFS), 不象 EXAFS 仅局限在紧密相邻原子间的局部结构信息, 而能透漏第一配位层以外的结构信息。然而截止目前为止, ARPEFS 尚未用到液体结构的研究。另外 DAFS、EXAFS 和 XANES 技术, 反常 X 射线散射(AXS) 技术, 也被用于溶液结构直接测量, 但文献报道仍然很少。电子衍射

没有特殊的优点。光散射法由于散射强度太低而未受到广泛重视。NMR 间接给出的原子核间距和配位数明显偏低。新近 Wang^[12] 等用光电子谱研究气相硫酸盐离子对引起人们关注。计算机技术,如从头计算(ab initio)、分子动力学模拟(MD)、蒙特卡罗模拟(MC)、分子动力学模拟(MM)及其它们组合,也能提供目前实验不能观测到的结构信息,但缺乏实验支持。ND、EXAFS、ARPEFS、XANES 等共同特点都属于溶液局部结构信息。新近人们用超快光谱研究水合层动态学及其相关的氢键动态学研究取得了明显的进展,人们盼望十年之久的时间分辨衍射和时间分辨 EXAFS 最近出现新的苗头^[13]。X 射线衍射法具有较宽的适用范围,不仅可测量第一配位层的键长、配位数、键角和空间构型等结构信息,而且可获得对大面积相变极有意义的第一配位层以外结构信息。

同步辐射光源是液体结构研究的最重要手段之一。实验室衍射仪测量液体结构,由于光源强度太弱,最大的缺点是相当费时。由于同步辐射光源具有方向性强、高辐射强度、高稳定性等优异性能,远远超过普通 X 射线管特征 X 射线,是液体结构研究最理想的光源。同步辐射 EXAFS 和 XANES 较早用于化学体系或者生物化学体系的溶液结构定性研究,如过渡金属和稀土氯化物水溶液,溶液中血红蛋白等。1999 年报道了用 ESRF AXS 技术观测到水分子共价键电子云泄露到氢键^[14],与 Pauling(1935)量子化学预测惊人地相吻合。Hura 和 Sorenson^[15,16] 用 ALS 光源透射法对室温液体水进行了高质量 X 射线散射研究,获得 3 个 RDF 峰比文献更高更敏锐,证实已出版衍射数据系统与统计误差和超过 2%。这一方向性探索研究对于液体 X 射线衍射研究意义极大。迄今为止,未见用 SR 衍射法研究溶液结构的报道。使用 SR 光源不仅可快速获得高质量的衍射数据,而且可能获得一些鲜为人知的实验事实。

电解质水溶液结构研究,对于无机分子工程的发展是很有意义的。我国 3 大类型盐湖中,氯化物型盐湖为数很少,但盐类储量巨大。硫酸盐类型盐湖占数千个盐湖三分之二,其中硫酸镁亚型盐湖占多数,硫酸钠亚型为数较少。

占地球表面积三分之二的海水,也属于硫酸镁亚型。碳酸盐类型盐湖占总数的三分之一,大多硼锂铷铯储量丰富。硫酸盐类型和碳酸盐类型盐湖浓缩后期卤水属于硼酸盐亚型盐湖。氯化物类型和硫酸镁亚型盐湖浓缩后期为硝酸盐亚型盐湖。这里硫酸盐、碳酸盐、硝酸盐和硼酸盐都含有多原子阴离子。多原子离子水溶液复杂结构,决定了其性质如密度、溶解度和相平衡等。特别是成核粒子结构,对阐述工业上的大面积相变、过饱和现象和介稳相平衡,意义重大。这些盐类溶液结构研究目前仍然是溶液结构的薄弱环节。无论是利用介稳相图发展无能耗无污染的综合利用工艺,还是发展盐类的分离提取技术,都离不开水分子与离子分子水平的知识创新。从根本上来看,构成天然水体的化学实体分子和离子相互作用,是贯穿于盐湖研究的关键性基础问题之一。

溶液结构参数和径向分布函数不仅是发展晶格模型和径向分布函数模型两大类溶液理论必不可少的基础;而且是多元水盐体系相平衡和介稳相平衡研究、溶液宏观热力学性质的重要基础。Pitzer 离子相互作用模型,是继德拜休克尔极限定律后的具有里程碑意义的现代电解质溶液理论。黄子卿先生曾准确指出,其应用问题已经基本解决。近年来参数化研究已经表明,Pitzer 模型推广到极高浓度时往往捉襟见肘,说明在理论上不是十分完善的。就对于溶液理论发展意义而言,尽管多原子离子的重要性不如单原子离子重要,但是大量存在于多原子离子溶液中离子对复杂水合的重要性超过单原子离子的简单水合。科学的发展是无止境的,发展溶液理论也是十分必要的。

3 现状分析

水和水溶液结构,一直是最大的科学未解之谜之一。它是人们研究最多,也是人们所知最少的体系。1959 年 Hamee《电解质溶液的结构》,其“结构”的意义不同于当今衍射法获得的弥散结构,严格地说在很大程度上属于结构敏感的性质。由于当时实验条件的限制,如圆柱几何的照相技术,充其量能观察到很宽的晕状

花样, 很难分离峰与背景。峰背分离的难题困扰了很长时间。1939 年美国海军研究所研制出第一台 $\theta-2\theta$ 型粉末衍射仪。五六十年代在吸收校正、极化校正、标度方法、多重散射、相对论 Hartree-Fock 波函数计算不相干散射等方面的理论储备, 特别是液体结构函数或折合强度等概念的提出, 以及上世纪 70 年代计算机技术的飞速发展和应用, 才使液体衍射研究成为现实。由于 $\theta-2\theta$ 型测角仪(立式和卧式)的 $\theta-2\theta$ 连动方式只能满足粉晶样品表面衍射, 而不能在各向同性的液体自由表面上衍射, 因而人们设计了能保持液体样品水平不动并置表面于测角仪轴上, 入射臂和衍射臂同时绕轴以 $\theta-\theta$ 方式连动的 $\theta-\theta$ 型 X 射线衍射仪, 解决了盛放液样问题以及避免了窗口衍射强度的影响。1964 年采用 $\theta-2\theta$ 型衍射仪透射法研究单原子液体结构的 Pings 等人设计 $\theta-\theta$ 型测角仪, 稍后美国橡树岭国家实验室也安装了这种实验装置。在没有 $\theta-\theta$ 型衍射仪的情况下, 研究液体结构是十分困难的。由于液体短程有序结构引起的干涉非常弱, 因而对大角度范围内衍射强度的精度要求非常高。特别是不能采用自由表面散射, 样品池窗口强度的校正就显得尤为重要。 $\theta-\theta$ 型衍射仪出现以前使用较多的透射法, 采用简单减法, 窗口能引起相当严重高角强度损失。它对衍射强度的标度, 特别是不能采用高角法和积分法联用标度而带来很大误差, 进而引起液体结构函数和径向分布函数很大误差。若回避高角强度损失, 则获得较小散射向量范围, 又会引起严重的截断误差和 RDF 低 r 区较大的乱真峰。透射法的缺点限制了它的应用, 事实上已被自由表面散射的 $\theta-\theta$ 型衍射仪所淘汰。用 $\theta-2\theta$ 型衍射仪平板样品池反射法测定液体结构, 文献未见报道; 但与此相近的采用 $\theta-\theta$ 型衍射仪 Mylar 膜覆盖法, 文献已有报道, 仅提及总强度减去窗口强度计算液体衍射强度。窗口材料也能引起很严重的低角强度损失。对 $\theta 20^\circ$ 以前发生较强干涉的液体来说, 低角强度损失是个非常严重的问题。

目前发达国家在实验条件上占优势, 而国内由于实验设备限制很难开展这方面研究工作。作者从 1993 年开始, 率先在国内开展液体

结构衍射研究。在国家基金委主任风险基金资助下, 特别是在没有 $\theta-\theta$ 型 X 射线衍射仪的情况下, 另辟蹊径, 打破旧框架, 发展了溶液结构 X 射线衍射研究的数据处理技术, 建立了用专门测定固体特别是粉晶结构的 $\theta-2\theta$ 型衍射仪精确测定液体结构的新方法。我们推导了低角强度损失的校正公式, 为粉末衍射仪测定液体结构的峰背分离提供了一种普适性方法。这种方法与标准方法即自由表面衍射法比较, 其优点是: 第一, 特别适合于没有自由表面的低温气体, 而标准方法是不可能实现的; 第二, 特别适合于过饱和溶液和较大挥发性液体(如 CCl_4 等)研究, 而自由表面衍射引起这些溶液的相变; 第三, 特别适合于移植到同步辐射 N($N=2, 4, 5, 6, 8, \dots, 11$) 圆测角仪, 而 $\theta-\theta$ 连动方式在同步辐射上几乎没有可能; 第四, 特别适合于平板样品反射法和透射法的联用。这种方法缺点是 0.7 nm 以后径向分布函数波纹较大, 对短程有序结构参数定量计算影响不大。其原因是仪器宽化在低角较为突出, 可以用透射法和反射法联用彻底克服。

高浓或过饱和多原子离子水溶液结构是溶液结构研究的制高点之一。截止目前为止, 水溶液结构的研究, 绝大多数集中在金属离子卤化物溶液的研究。如碱金属氯化物, 研究的浓度范围宽, 温度和压力范围大, 从常温常压到高温高压甚至超临界, 并几乎采用了所有的现代研究方法, 如 X 射线衍射、中子衍射、EXAFS、蒙特卡罗模拟、分子动态学模拟和从头计算等。由于多原子离子水溶液的特殊复杂性, 采用的方法仅局限于 X 射线衍射研究, 研究的浓度范围小, 而且局限在常温常压。碳酸盐水溶液仍然属于尚未开垦的处女地。对于硼酸盐, 除了光谱学给出了某些物种的化学形态外, 文献唯一报道的就是由从头计算给出了硼酸水溶液的径向分布函数。整个过饱和溶液结构也基本上属于一片空白。由于 $\theta-\theta$ 型 X 射线衍射仪自由表面衍射法容易引起水溶液的大量蒸发而导致晶体析出, 及模型计算上的困难, 因此对过饱和和含氧酸盐溶液结构的实验研究, 目前尚未见报道。我们开发的实验方法, 样品池内液体不能进行物质交换, 特别适合于过饱和溶液结构

的研究。

4 研究进展

近年来溶液结构研究的进展是很大的。由于本文主题的限制,我们不进行详尽叙述,只简单叙述公众感兴趣的科学问题。最近用衍射^[17-20]和超快光谱学方法^[3, 21-32]可透彻了解普通盐类溶液结构和动态学。尤其是近年来用超快光谱法的溶液结构研究异军突起,涉及时间标度已达到沙秒(10^{-12} S)、尘秒(10^{-15} S)和渺秒(10^{-18} S)。在氢键动态学、卤素离子 X^- , OH^- 和 H^+ 水合、质子离域作用、液态水自电离机理等研究取得了可喜的进展。Omta 等^[2]研究表明,离子加入不影响第一水合层外水分子旋转动态学,离子存在并不引起液态水氢键网络结构的增强和破坏,这对近百年来人们研究粘度得出的又被 NMR 证实的结构增强和结构破坏的观点是一种直接的挑战。上世纪人们认为水分子失去一个质子形成 OH^- 离子,像“质子洞”迁移机理也受到第一原理计算机模拟的冲击,迁移机理与质子洞图象大不相同,并强烈受到核量子效应的影响^[33]。过冷水及冰晶核形成^[34-36]与过饱和溶液^[41]结构研究,也取得了一些进展。然而对多原子离子水溶液大多易形成过饱和溶液和介稳相平衡,其结构研究远不如单原子离子水溶液^[37-41]。最近对质子水合簇^[43]研究表明,水合质子水合数在 $n=4$ 到27之间, $4 < n < 10$ 质子水合簇为链状结构, $10 < n < 21$ 为二维网络结构, $n > 21$ 形成所谓“纳米笼”。水合电子目前被认为是带负电荷的水分子簇^[43]。值得注意的是,这些问题研究难度似乎远不如过饱和溶液,但社会公众感兴趣程度非常高。

5 发展战略与对策

我国同步辐射光源近几年得到了长足发展。中国科技大学同步辐射装置经二期改造工程后,目前仪器设备已属一流,但光源波长尚不非常合适于液体测量。中国科学院高能物理所正负电子对撞机正在进行二期工程建设,竣工

后 BSRF II 将成为世界上最强的光源之一。正在建设中的上海光源,预期散射站设计能量范围将非常适合液体的研究。近年国家立项支持建设我国第一个裂变中子源先进实验平台,脉冲激光 X 射线光源实验平台建设也在预研之中。这些无疑为液体结构的发展提供了一次非常重要的机会。因此,笔者建议以下 4 点,作为溶液结构战略的突破口。

依托盐湖资源为背景,发展溶液结构研究。盐湖资源本质上是天然的多组份电解质溶液。与盐湖资源相关的地下卤水和海水等,共同控制着地球“五圈”平衡。这实际上把溶液结构研究带到某种意义的跨学科层次。自从上世纪 80 年代以来,化学逐步系统地进入分子水平研究。从分子离子水平上对盐湖资源进行阐述,是化学发展的迫切需要,也是盐湖资源开发的迫切需要,更是改变盐湖化学落后面貌的需要。最终把资源特色转变为研究特色。

以衍射法为战略大后方,逐步发展同步辐射新方法研究。为了使目前研究工作进入新的突跃,逐步发展同步辐射衍射法、EXAFS 和 DAFS 等新方法,如果可能开发时间分辨 X 射线衍射和时间分辨 EXAFS 以及中子衍射研究,实现与当代物理学深度交叉。

以研究多原子离子水溶液为主要方向,出其不意地选择人们感兴趣的液体结构问题。选择当前各学科共同感兴趣的问题,是十分困难的,其中最大的困难是对选题本身的科学预见性,也就是预期结果的空前新颖性,以及对本领域及其相关领域或者相关学科的深远影响力。

以研究溶液结构为主要阵地,有选择性地辐射到某些溶液结构与溶液性质的研究。通过模型简化和抽象,用半经验方程描述结构和性质,仍然是可行的。

然而科学创新活动具有非常独特的自身内部发展运动规律。研究和运用科学发展内部运动规律,是推动中国科学进步的支点,而经费和仪器支撑条件是科学进步的杠杆。只要有了杠杆和支点,挑战未知并非神话。科学创新活动不仅需要研究者本身事业心、开拓精神和驾驭能力,而且更重要的是需要组织管理部门给予必需的经费、仪器和管理方面的宝贵支持。

参考文献:

- [1] 21 世纪初科学发展趋势课题组. 21 世纪初科学发展趋势[M]. 北京: 科学出版社, 1996. 163.
- [2] Barbour L J, Orr G W, Atwood J L [J] Nature, 1998, 393 (6686): 671—3
- [3] Alex J U, Richard J S [J] . Science, 2003, 299(5611): 1329—30.
- [4] Robertson W J, Dick E G, Price E A, Shin J W, Johnson M A [J] . Science, 2003, 299(5611): 1367—72.
- [5] Pasquarello A, Petri I, Salmon P S, parise l O, sl et [J] . Science, 2001, 291(5505): 856—9
- [6] Vaniman D T, Bish D L, Chipera S L, al et [J] . Nature, 2004, 431(7009): 663—5
- [7] Kemper F, Jager C, ale [J] . Nature, 2002, 415(6869): 295—7.
- [8] Jeffrey M M, [J] . Nature, 2004, 428(6984): 711—2
- [9] Wyatt M B, McSweeney H Y, [J] . Nature, 2003, 421(6924): 712—3
- [10] Victoria E U, Hamilton P R, al et [J] . Nature, 2003, 421 (6924): 711—3.
- [11] Fairen A G, Fernandez—Remolar D, al et [J] . Nature, 2004, 431 (7007): 423—6.
- [12] Wang X B, Yang X, Nicolas J B, Wang L S [J] . Science, 2001, 294(5545): 1322—5.
- [13] Hatanaka K, Miura T, Odaka H. [J], Anal. Chem. 2003, (6): 373—81(Jp).
- [14] Hellemans A [J]. Science, 1999, 283, 651.
- [15] Hura G, Sorenson J M [J] . J. Chem Phys, 2000, 113, 9140
- [16] Hura G, Sorenson J M [J] . ibid, 2000, 113, 9149
- [17] Dixit S, Crain J, Poon W C K, Finney J L, Soper A K [J] . Nature, 2002, 416(6883): 829—32
- [18] Ramos S, Neilson G W, Bames A C, Capitan M J [J] . J. Chem. Phys., 2003, 118(12): 5542—6
- [19] Adya A K.; Kalugin O N [J] . J. Chem. Phys., 2000, 113 (11): 4740—50.
- [20] Badyal Y S, Simonson J M [J] . J. Chem. Phys., 2003, 119 (8): 4413—8
- [21] Fecko C J, al et, [J] . Science, 2003, 301(5640): 1698—702
- [22] Bakker H J, Nienhuys H. K [J] . Science, 2002, 297 (5581): 587—90.
- [23] Geissler P L, al et [J] . Science, 2001, 291 (5511): 2121—4
- [24] Lehr L, Zanni M T, Frischkom C [J] . Science, 1999, 284 (5414): 635—8
- [25] Bucksbaum P H [J] . Nature, 2003, 421(6923), 593—4.
- [26] Kropman H J, Bakker H J [J] . Science, 2001, 291 (5511): 2118—20
- [27] Omta W, Kropman M F, Woutersen S, Bakker H J [J] . Science, 2003, 301(5631): 347—9.
- [28] Robertson W H, Dicken E G, Johnson M A [J] . Science, 2003, 301(5631): 320—1.
- [29] Dellin J P, Uras N, Sadie J, Buch V [J] . Nature, 2002, 417 (6886): 269—71.
- [30] Samuel Leutwyler, [J] . Nature, 2002, 417(6886): 230—1
- [31] Asimis K R, Pivonka N L, Santambrogio G, Brummer M, al et [J] . Science, 2003, 299(5611): 1375—7.
- [32] Klein M I [J] . Science, 2001, 291(5511): 2106—7.
- [33] Tuckerman M E, Marx D, Parrinello M [J] . Nature, 2002, 417(6892): 925—9.
- [34] Matsumoto M, Saito S, Ohmine I [J] . Nature, 2002, 416 (6879): 409—13.
- [35] Baker M [J] . Nature, 2001, 413(6856): 586—7
- [36] Koop T, Luo B P, Tsias A, Peter T [J] . Nature, 2000, 406 (6796): 611—4
- [37] Head-Gordon T, Hura G [J] . Chem. Rev., 2002, 102, 2651.
- [38] Ohtaki H and Radnai T. [J] . Chem. Rev, 1993, 93, 1157.
- [39] Fang C. —H. [J] . Prog. Chem., 1996, 8, 316(in Chin.)
- [40] Johansson G. [J] . Adv. Inorg. Chem., 1992, 39, 401.
- [41] Fang C H, Fang Y, Guo Y M, al et [J] . Acta Chemica Sinica, 2004, 62(3): 168
- [42] Miyazaki M, Fujii A, Ebata T, Mikami N [J] . Nature, 2004, 304(5674): 1134—7.
- [43] Kenneth D J [J] . Science, 2004, 306(5696): 618—9.

A View on Developing Strategy of Solution Structure

FANG Chun-hui, FANG Yan

(Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xining 810008, China)

Abstract: Solution structure has been defined as a fundamental science, investigating the microscopic structure of the solvated species in solution as well as the relationship between its structure and macroscopic property. The object, methodology, and scientific significance of solution structure studies have been simply described in the present paper. The developing strategy has been discussed in detail.

Key words: Solution structure; Liquid structure; X—ray diffraction; Synchrotron radiation; Poly-atomic ion; Aqueous solution; Developing strategy