
大连化物所发现分子振动对氢键体系红外光谱的作用机制

作者：writer 来源：中国科学院

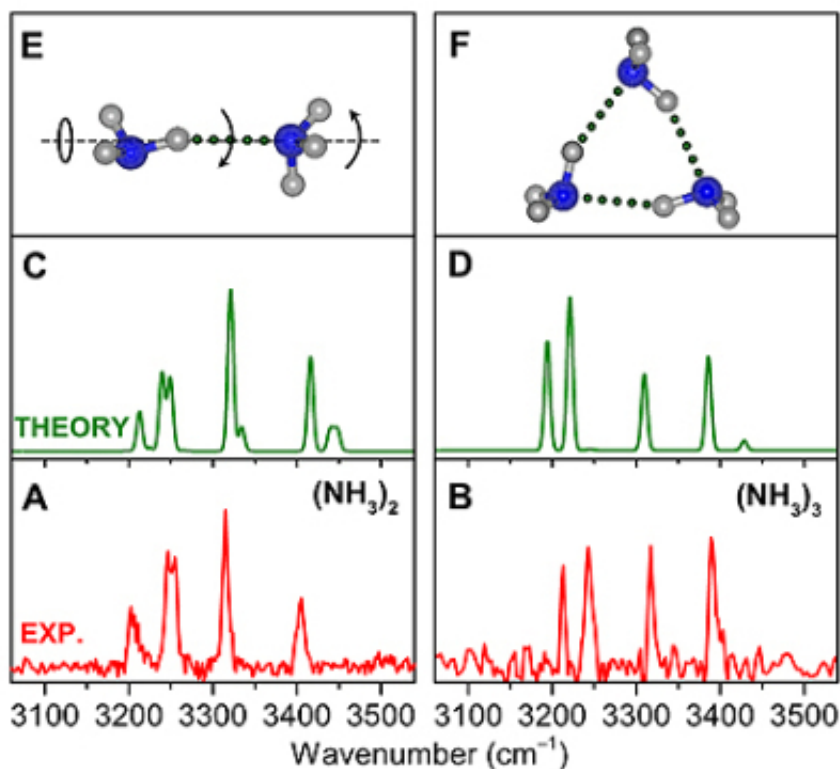
本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10112.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室和大连光源科学研究所研究员江凌、副研究员张兆军，中科院院士张东辉研究团队，与台湾原子与分子科学研究所研究员郭哲来研究团队合作，利用自主发展的中性团簇红外光谱实验方法，揭示分子振动对氢键体系红外光谱的作用机制。

分子振动是构筑物质结构、光谱及动力学的基石。在氢键或范德华力键合的弱相互作用体系中，分子不停地振动转动、断键成键，形成各种动态的瞬态结构和柔性多变的势能面，给理解分子振动模式的贡献造成困难。因此，精确解析分子振动对红外光谱及动力学的作用机制是科学家们的梦想，但至少存在两个挑战：一是获得分辨较好的实验红外光谱，二是需要可靠的理论方法精准计算红外光谱的谱峰位置和相对强度。

氨气在大气环境、工业催化等领域具有重要作用，氨气团簇是研究分子振动对红外光谱及动力学作用机制的典型氢键体系。然而，由于缺乏原子尺度的实验表征手段以及精准可靠的理论计算方法，氨气团簇的红外光谱指认仍存在争议。研究中，江凌团队利用自主发展的中性团簇红外光谱实验方法（[J. Phys. Chem. Lett.](#), 2020, 11, 851），对中性氨气团簇开展研究，获得了分辨较好的实验红外光谱（图A和B）。



张兆军和张东辉团队利用自行发展的全维势能面动力学理论方法，郭哲来团队利用自主发展的非谐性量子化学理论方法，分别精准计算了氨气团簇的瞬态结构（图E和F）和红外光谱（图C和D），理论与实验高度吻合。研究表明，红外光谱的贡献主要来自于质子授体氨，NH伸缩振动基频与NH弯曲振动泛频之间的非谐性耦合产生了显著的费米共振（3150至3300 cm⁻¹）。

该研究工作通过提高实验红外光谱的分辨率和理论方法精准预测的有效性，揭示了分子振动对氢键化合物红外光谱及动力学的作用机制，解决了长期以来对氨气团簇红外光谱指认的争议，为大气雾霾和生物分子功能等领域的前沿科学研究提供了新策略。

相关成果发表在 [CCS Chemistry](#)

上。研究工作得到了国家自然科学基金委“动态化学前沿研究”科学中心项目、中科院战略性先导专项（B类）“能源化学转化的本质与调控”、自然科学基金面上项目、大连化物所大连相干光源专项基金项目等的资助。

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](#)转发