大连化物所等利用大连相干光源发现迄今最小冰立方新结构

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/11606.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！

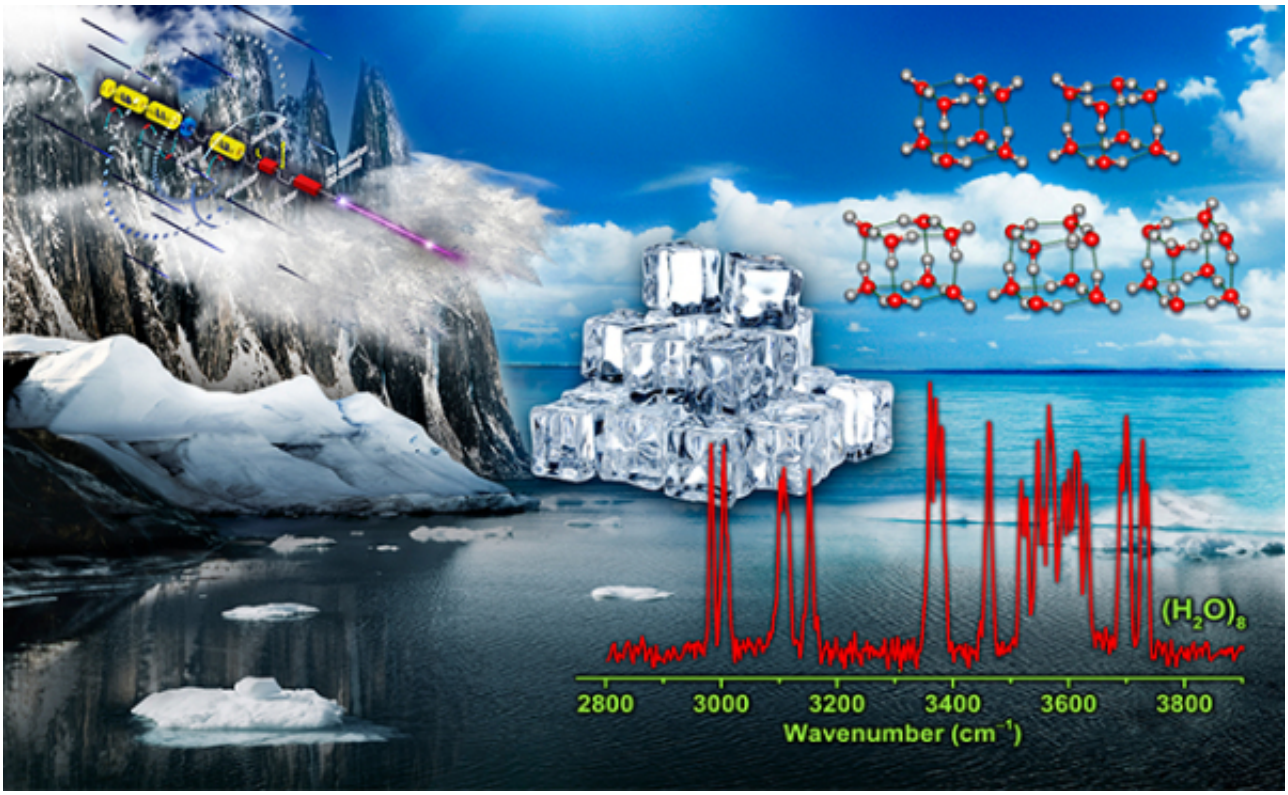
近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员江凌与中科院院士、大连化物所研究员杨学明团队，与清华大学教授李隽团队合作，利用自主研制的基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验方法，发现多个最小冰立方的新结构，这些最小冰立方是由八个水分子组成的水团簇，该研究为揭开冰的微观结构和形成机制提供新思路。

冰在生活中普遍存在，然而，由于冰的结晶过程迅速且难以控制，精确解析微冰结构和形成机制仍是难题。研究水分子成长为水分子团簇、液态水和冰的过程，有利于理解冰的微观结构和形成机制。红外光谱是研究物质结构的有效方法之一，与离子团簇不同，中性水团簇由于缺乏电荷、难于探测，实验研究少，因此，实现质量选择的中性水团簇的红外光谱研究是科学家的目标。

为实现精准探测和结构解析中性水团簇，近年来，江凌和杨学明团队在相关实验技术发展上取得进展，自主研发出基于大连极紫外自由电子激光（大连相干光源）的中性团簇红外光谱实验方法，首次实现质量选择中性水团簇的高灵敏探测及红外光谱的研究（*The Journal of Physical Chemistry Letters*），发现最小的水滴是由五个水分子组成的水团簇（*Proc. Natl. Acad. Sci.*）。该实验方法有利于开展各类中性团簇红外谱学和结构的研究。

近日，江凌和杨学明团队利用自主研制的中性团簇红外光谱实验装置，测定质量选择中性水分子八聚体（H_2O）$_8$的红外光谱，呈现冰的光谱特征；李隽团队采用自编的TGMin程序，结合量子化学理论方法，计算水分子八聚体的各种稳定结构和红外光谱，理论与实验吻合。研究表明，水分子八聚体存在5个稳定的立方体结构，其中3个水立方体结构首次被实验观测到。这些立方体结构中的水分子均以三配位的方式结合在立方体的顶角，这些特殊结构的优异稳定性源于大量的离域三中心二电子（3 center-2electron）氢键作用。此外，冰表面存在这种三配位的水分子团簇。该研究揭示了最小冰立方的多个新结构，为揭开冰的微观结构和形成机制（尤其是速冻）提供新思路，对大气科学和水科学等的研究具有意义。

相关研究成果发表在《自然-通讯》（*Nature Communications*）上。研究工作得到国家自然科学基金委“动态化学前沿研究”科学中心项目、中科院战略性先导科技专项（B类）“能源化学转化的本质与调控”、中科院国际大科学计划培育专项“利用大连相干光源开展能源转化基础科学研究”、自然科学基金面上项目、科学挑战项目、大连相干光源专项基金项目等的支持。



大连化物所利用大连相干光源发现最小冰立方新结构

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