

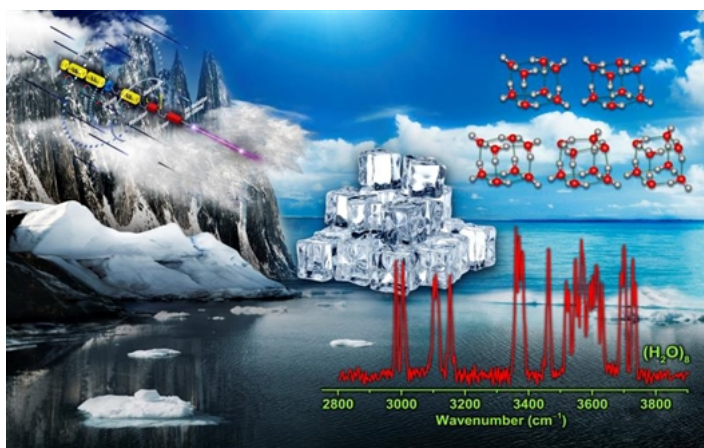
# 科学家利用大连相干光源发现冰立方新结构

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11633.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！

科学家利用大连相干光源发现冰立方新结构。



利用大连相干光源发现最小冰立方新结构 李钦明供图 近日，中科院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室大连光源科学研究所研究员江凌和院士杨学明团队与清华大学教授李隽研究团队合作，利用自主研发的基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验方法，发现了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，此项研究作为揭开冰的微观结构和形成机制提供了新思路。相关成果发表于《自然—通讯》。冰在人们的生活中，是普遍存在的。然而，由于冰的结晶过程非常迅速并且难以控制，精确解析微冰结构和形成机制仍是一个巨大的科学难题。研究水分子如何一步步成长为水分子团簇、液态水和冰的过程，对理解冰的微观结构和形成机制至关重要。红外光谱是研究物质结构的最有效方法之一。与离子团簇不同，中性水团簇由于缺乏电荷、难于探测而实验研究甚少，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长期以来的梦想。为实现对中性水团簇的精准探测和结构解析，江凌和杨学明团队近年来在相关实验技术发展上取得了突破，自主研发了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，首次实现了质量选择中性水团簇的高灵敏探测及红外光谱的研究，发现了最小的水滴是由五个水分子组成的水团簇。打破了长期以来人们对最小水滴为六个水分子的认识，这一独特的实验方法也为开展各类中性团簇红外谱学和结构的研究打开了大门。近期，江凌和杨学明团队利用自主研发的中性团簇红外光谱实验装置，测定了质量选择中性水分子八聚体(H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>的红外光谱，呈现出冰的光谱特征。清华大学李隽研究组采用自编的TGMin程序结合高精度的量子化学理论方法，计算了水分子八聚体的各种稳定结构和红外光谱，理论与实验高度吻合。研究结果表明，水分子八聚体存在5个稳定的立方体结构，其中3个水立方体结构是首次被实验所观测到。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氢键作用。更有趣的是，在冰的表面确实存在着这种三配位的水分子团簇。该研究工作揭示了最小冰立方的多个新的结构，为揭开冰的微观结构和形成机制（尤其是速冻）提供了新思路，对于大气科学和水科学等领域

---

的研究具有重要的科学意义。（来源：中国科学报 刘万生 李刚）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-020-19226-6>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：[shouquan@stimes.cn](mailto:shouquan@stimes.cn)。

作者：江凌等 来源：《自然—通讯》

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](http://www.iikx.com)转发