
大连化物所等利用大连光源揭示氢键费米共振新机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12953.html>

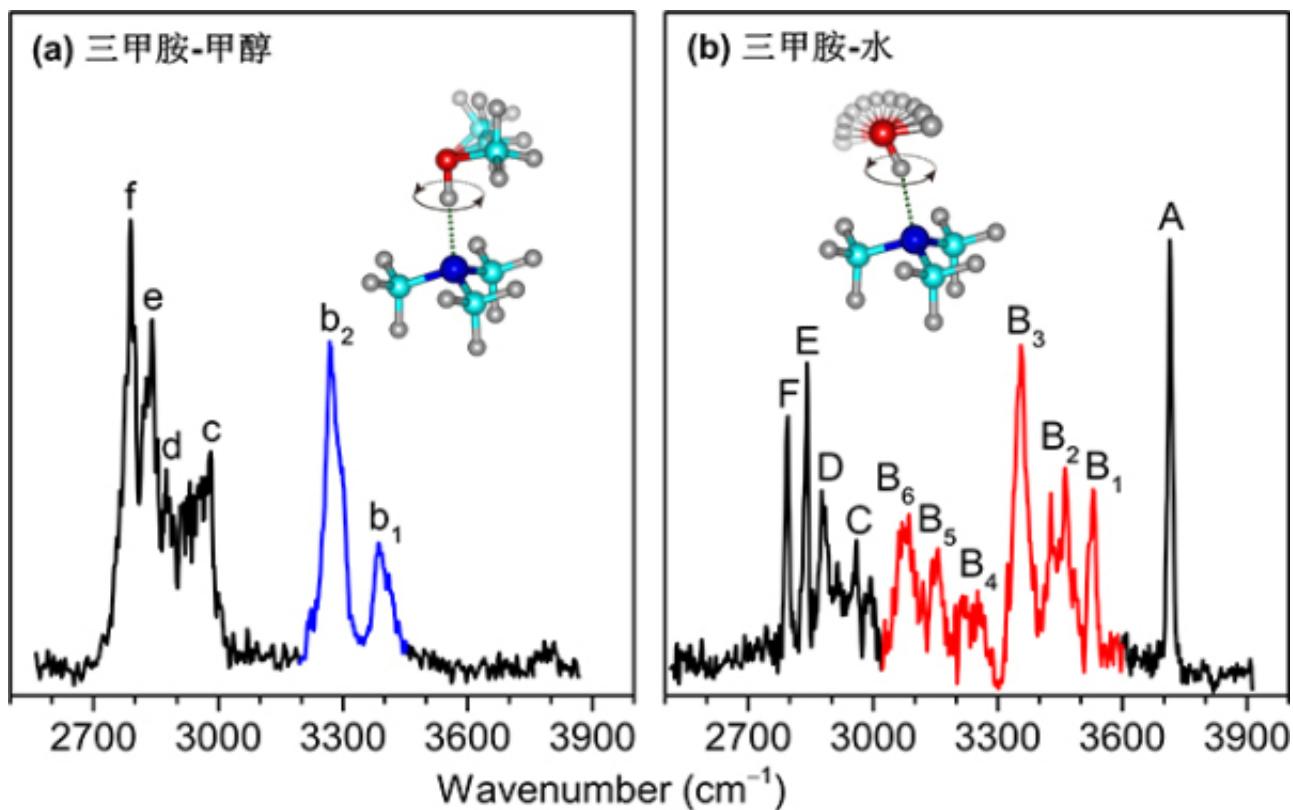
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

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研究员江凌团队、副研究员张兆军和院士张东辉团队，与台湾原子与分子科学研究所研究员郭哲来团队、香港中文大学教授刘志锋团队合作，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装置，发现水-胺团簇中氢键的异常大幅度波动现象，揭示出多种分子振动耦合产生剧烈费米共振的氢键作用的本质。

氢键是雾霾颗粒物、分子自组装、生物体系等主要分子间作用力。氢原子质量轻，本质上是波动的，这对确定结构、性能和反应机理等方面起着关键作用。由于三甲胺分子的氮原子孤对电子可以与水和甲醇等溶剂分子形成较强的氢键，三甲胺团簇的研究备受关注。1962年，D. J. Millen等人使用傅里叶红外光谱仪测得了三甲胺-甲醇的红外光谱，发现了一个较宽的OH伸缩振动峰，但由于该红外吸收光谱的分辨率低，溶剂分子在氢键波动中起着什么样的作用、什么样的分子运动引发了如此之大的氢键波动等关键科学问题仍没有答案。

研究人员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装置，测得了中性三甲胺-甲醇团簇和三甲胺-水团簇的高分辨红外光谱，在三甲胺-甲醇红外光谱中，原红外吸收光谱中较宽的OH伸缩振动峰劈裂为2个峰。在三甲胺-水团簇红外光谱中发现至少6组氢键结合的OH伸缩振动峰。这些对比表明，三甲胺-水团簇的氢键波动比三甲胺-甲醇更剧烈。研究团队利用自行发展的全维势能面动力学理论方法计算了三甲胺-水团簇的红外光谱，利用非谐性量子化学理论方法计算了三甲胺-甲醇团簇的红外光谱，利用从头算分子动力学理论方法分析了这两种团簇的动力学特征。研究表明，在三甲胺-水团簇中，氢键结合的OH伸缩振动与水分子的多种运动模式（平动、摇摆和弯曲）发生了强烈的费米共振，从而产生了异常复杂的多组OH伸缩振动谱峰。当水分子的氢原子被甲基取代后，由于甲基的空间位阻比氢原子大，导致甲醇绕着氢键的旋转速度比水分子慢，大幅度降低了OH伸缩振动与甲醇分子的费米共振程度，从而简化了OH伸缩振动谱峰。该工作对理解氢键化合物的红外光谱和化学反应机理具有重要意义。

相关研究成果发表在[The Journal of Physical Chemistry Letters](#)上。研究工作得到国家自然科学基金委员会“动态化学前沿研究”科学中心项目、“团簇构造、功能及多级演化”重大研究计划重点支持项目，中科院战略性先导科技专项“能源化学转化的本质与调控”（B类），大连化物所大连相干光源专项基金等的资助。



大连化物所等利用大连光源揭示氢键费米共振新机制

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](http://www.iikx.com)转发