
大连光源揭示氢键费米共振新机制

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12960.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！

大连光源揭示氢键费米共振新机制。近日，中科院大连化物所江凌研究员团队、张兆军副研究员和张东辉院士团队，与中国台湾原子与分子科学研究所郭哲来研究员团队、香港中文大学刘志锋教授团队合作，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，发现了水—胺团簇中氢键的异常大幅度波动现象，揭示了多种分子振动耦合产生剧烈费米共振的氢键作用的本质。相关研究发表在《物理化学快报》上。

氢键是最常见的分子间作用力，对确定分子结构、性能和反应机理等方面起着关键作用。由于氢原子的质量小、氢键的能量低，对氢键的研究一直是业界难点。三甲胺分子的氮原子孤对电子可以与水、甲醇等溶剂分子形成较强的氢键，成为理想的氢键研究对象。1962年，D.J.Millen等人测得了三甲胺—甲醇的红外光谱，发现了一个较宽的OH伸缩振动峰，这意味着氢键的波动浮动大。但由于该红外吸收光谱的分辨率太低，人们对溶剂分子在氢键波动中发挥的作用哪些分子运动引发了如此之大的氢键波动等关键科学问题一直没有答案。

该研究中，江凌团队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，较宽的OH伸缩振动峰劈裂为2个；在三甲胺—水团簇红外光谱中，意外发现了至少6组氢键结合的OH伸缩振动峰。这说明后者的氢键波动比前者更剧烈。

到底是什么原因导致了氢键波动的不同呢？研究团队希望用理论来解释这一切，但作为一种非经典的化学键，氢键之间作用力的计算尤其复杂。为此，多个研究组共同合作、分头行动，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计算出三甲胺—水团簇的红外光谱，郭哲来团队利用非谐性量子化学理论方法计算出三甲胺—甲醇团簇的红外光谱，刘志锋团队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。

各方将研究结果汇总分析后，发现三甲胺—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。三甲胺—甲醇团簇中，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，这大幅度降低了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。

江凌表示，该研究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，有望揭示雾霾颗粒物等复杂分子体系的形成机制。（来源：中国科学报卜叶）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c00168>

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。

作者：江凌等 来源：《物理化学快报》

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