
科学家发现氢键对称性普遍规律

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/18623.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！

科学家发现氢键对称性普遍规律。

为深入探索氢键对称相关问题，近日，北京高压科学研究中心（HPSTAR）研究员Thomas Meier带领国际研究团队，对一系列不同样品进行了高压原位核磁共振光谱测量，并发现了关于氢键对称化的统一规律——不同体系中氢键的对称都发生在氢原子流动最快的临界点，并且都对应于几乎相同的氧原子（距离氢原子最近邻）间距。

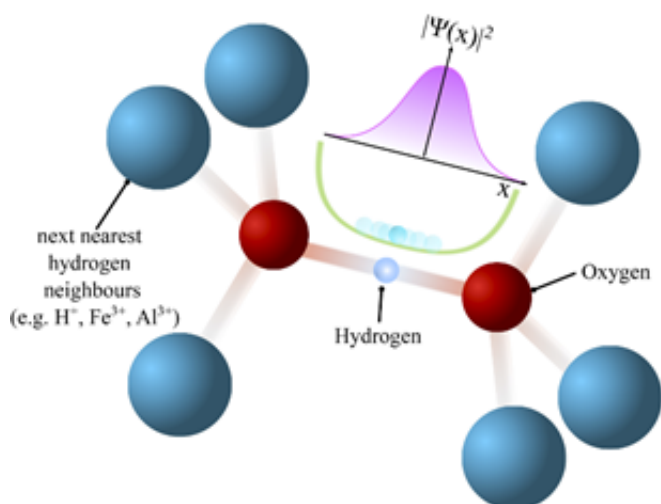
相关研究6月1日发表于《自然—通讯》（Nature Communications）。

氢键在自然界中无处不在，它们通过稳定DNA分子形成生命物质的骨架，是一些新材料得以存在和发现的关键，对氢键的研究也是当代凝聚态物质研究的驱动力之一。被氢键稳定的体系通常表现出丰富的物理现象，如相变、超离子态或高温超导性等。这些现象往往发生在氢键趋于对称的时候，即当氢原子位于两个较重的原子之间的几何中心位置时（如图）。

常压条件下，含有线性氢键的物质中的氢键是非对称的，随着压力增加，非对称氢键往往会趋于对称。高压下不同体系中氢键对称化的过程通常会伴随着不同的压缩性能，或者输运性质等物性的改变，因此研究者往往将氢键对称化与物质的结构相变、高低自旋转变等变化关联起来，然而这些关联性解释往往又自相矛盾。

之前，在金刚石对顶砧中使用衍射或光谱等常规方法直接研究氢原子一直受限于探测技术本身，导致对这些材料中氢键对称的基本物理机理缺乏深入了解。

核磁共振波谱法是一种广泛应用于化学和材料科学的诊断方法。然而在高压条件下，尤其是接近百万大气压的超高压条件下，运用核磁共振波谱法进行研究面临巨大挑战。为解决上述难题，Meier与合作者在该高压技术的发展上进行了探索与改进。在该工作中，他们使用自主研发的高压核磁共振技术对冰VII相/X相、镁硅酸盐相D，以及含铁和无铁铝氢氧化物进行了高压原位核磁共振光谱学研究，辅以高压X射线衍射测量。研究发现，在这些不同体系中，氢键对称发生时，与氢原子最近邻的氧原子的距离都会达到一个几乎相等的临界值，完全独立于样品的化学、结构甚至量子力学性质或所研究的氢键环境。



以氢原子为中心的局部氢键环境示意图 图片来源：研究团队

Meier指出，这些结果完全出乎我们的意料，因为我们所测试的所有样品在化学和结构上完全不同。这个结果可以统一和解释该领域许多相互矛盾的结果，例如，将氢键对称化与结构相变、电子自旋转变联系起来。我们的结果表明这些解释似乎都不正确，氢键对称实际上是一个完全独立的物理现象——当氢原子的迁移率达到最大时，氢键的对称化就开始了，并非发生于结构相变或自旋转变的压力点，因此可以说氢键对称化（从核磁共振的角度）与结构或自旋相变没有任何关系。（来源：中国科学报赵路）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-022-30662-4>

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：Thomas Meier 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](https://www.iikx.com)转发