利用中性金属氢氧化物可实现氢自由基的捕捉

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/22359.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！

利用中性金属氢氧化物可实现氢自由基的捕捉。

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员江凌、副研究员李刚实验团队联合研究员樊红军和郑州大学郑修成教授理论团队，采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装置，利用中性金属氢氧化物实现了高反应活性氢自由基的捕捉。相关成果发表在《物理化学快报》。

作为质量最轻的原子，氢自由基是催化、大气新粒子形成、星际氢气产生等诸多过程的关键中间体。氢自由基由于反应活性高、存活寿命短，对其捕捉具有挑战性。目前，离子型氢自由基加合物由于带有电荷，易于探测和质量选择，研究的最为广泛。而中性氢自由基加合物由于缺乏电荷，对其实验研究非常困难。因此，实现中性氢自由基加合物的制备与表征是科研人员长期以来的梦想。

针对上述挑战，江凌和李刚团队发展了高通量的激光溅射团簇源，利用基于大连相干光源的红外—极紫外(IR-VUV)双共振红外光谱实验方法，研究了第三族金属原子与水的反应过程。团队采用激光溅射和超声分子束冷却技术，制备了中性MO3H4(M = Sc, Y, La)复合物。并且将红外激光振动激发与193nm极紫外激光电离相结合，测定了它们的红外光谱。樊红军和郑修成等采用高精度的量子化学理论方法，计算了这些产物的各种稳定结构和红外光谱，理论和实验结果高度吻合。

研究表明，这些产物均为氢自由基加合物H · M(OH)3，其中一个氢原子与相邻的氧原子和金属原子同时形成了弱相互作用的化学键，该氢原子的电子自旋密度为0.76，显示其拥有自由基的特征。团队提出了形成该氢自由基加合物H · M(OH)3应该具备的先决条件，即需要在具有软氦气膨胀的激光溅射团簇生长通道中进行有效碰撞，以实现碎片的结合反应生成H · M(OH)3。

该研究工作发现了具有高活性的中性金属氢自由基加合物，为制备具有特殊物理化学性质的物种提供了新策略。(来源：中国科学报 孙丹宁)

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.3c00079

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转发