星际富勒烯红外谱数据库的构建与可靠预测取得进展

作者：writer 来源：科学网

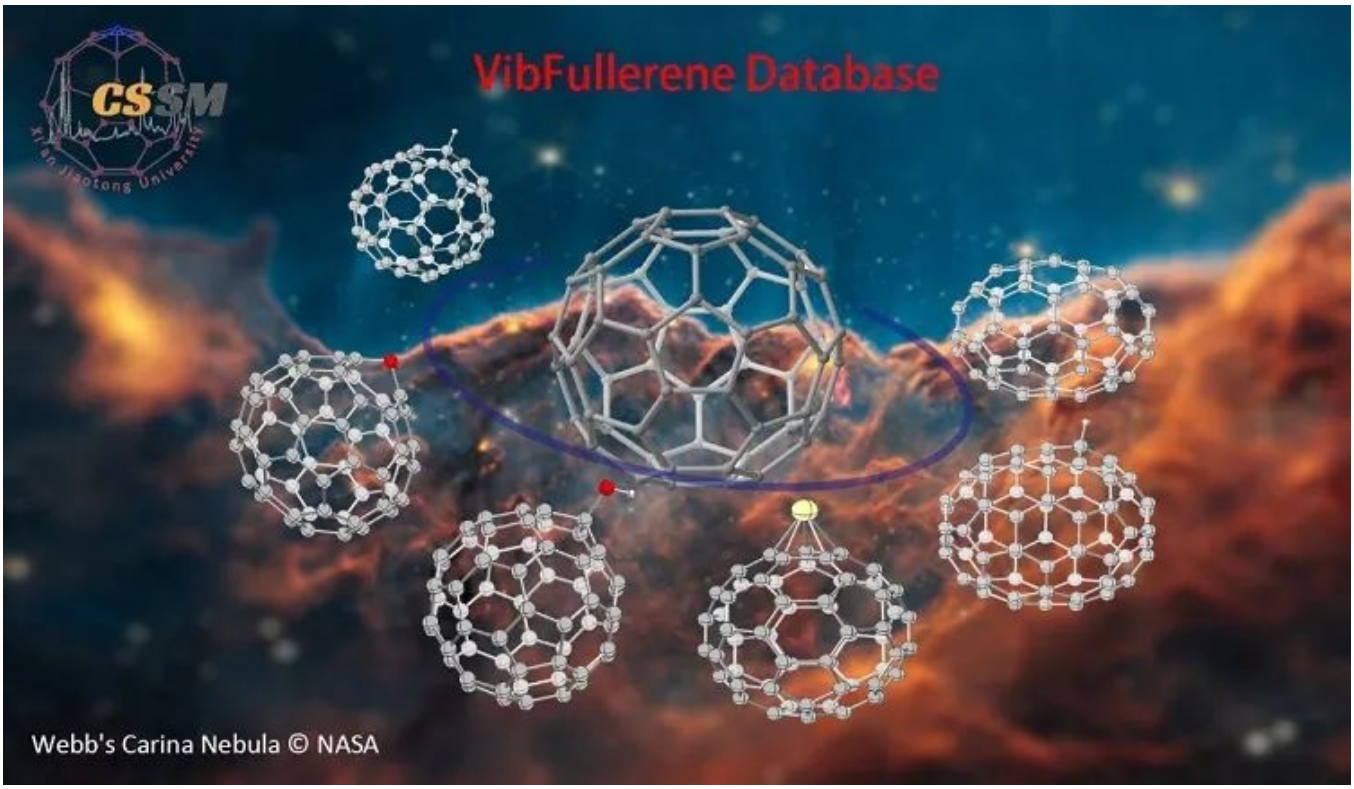
本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/23986.html

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！

星际富勒烯红外谱数据库的构建与可靠预测取得进展。

富勒烯C60的发现起源于人们对星际碳物质的探索，获得1996年诺贝尔化学奖的Kroto教授曾于1980年代末期提出猜想：星际空间中，富勒烯可与其他星际分子/离子通过离子-分子或分子-分子反应形成富勒烯衍生物从而存在于星际空间。事实上，研究人员已经通过化学或物理方法合成了数百上千种富勒烯衍生物。那么，如何确认富勒烯衍生物以及哪些富勒烯衍生物存在于星际空间，仍然是一个极具挑战的难题。

基于此，西安交通大学侯高垒教授联合多个研究团队，利用自主发展的质谱-光谱联用实验技术，首次测量得到了气相富勒烯-金属复合物在6-25微米范围的高分辨红外谱，并通过与Spitzer空间望远镜得到的天文观测谱比对分析，发现富勒烯-
金属复合物可潜在贡献于星际未证认红外发射谱带和弥散星际谱带。



七种富勒烯物种的振动频率汇编为VibFullerene数据集。(课题组供图)

最近，在上述工作基础上，侯高垒教授团队将目前所有已报道的实验测量的C60、C60+、C60H+、C60O+、C60OH+、C70和C70H+等七种富勒烯物种的振动频率汇编为VibFullerene数据集。研究人员利用密度泛函理论对VibFullerene数据集中的90余个频率数据进行统计分析，在综合考虑计算成本与计算可靠性的基础上，拟合得到了各种常用理论计算水平下适合于富勒烯物种红外谱可靠预测的频率校正因子。研究人员将通过所得校正因子校正的富勒烯-金属复合物的理论红外谱与实验测量谱进行对比，发现理论与实验吻合很好，表明了研究所构建VibFullerene数据集的合理性与所得频率校正因子的可靠性。

上述研究成果近期发表在国际著名天文期刊《皇家天文学会月报》。西安交通大学物理学院侯高垒教授设计领导了该研究，为论文的通讯作者，博士生徐健智为论文第一作者。该研究得到了国际知名天体物理学家美国密苏里大学Aigen Li教授与中科院新疆天文台李小虎研究员的合作与支持。西安交通大学物理学院和物质非平衡合成与功能调控教育部重点实验室为论文的通讯作者单位，研究工作得到了国家自然科学基金和西安交通大学青年拔尖人才支持计划等的支持。(来源：中国科学报 严涛)

相关论文信息：https://doi.org/10.1093/mnras/stad2335

作者：高垒等 来源：《皇家天文学会月报》

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