# 科学家揭示碱溶解过程的微观机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/37892.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！*

**科学家揭示碱溶解过程的微观机制**。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员江凌、副研究员李刚团队，利用自主研制的中性团簇红外光谱实验站，系统研究了BaOH水合团簇的结构演变与解离过程，发现仅需3个水分子即可诱导Ba与OH地分离，揭示了碱溶解过程的微观机制，为理解闭壳层体系的早期溶剂化过程提供了新思路。相关成果发表在《美国化学会志》。

碱的溶解是酸碱化学中的重要基本过程，在电池、医药等领域具有重要作用。其中，多少个水分子可以促使碱开始溶解？是该领域最具挑战性的关键科学问题之一。在复杂的溶剂环境中，利用常规的实验方法难以测量氢键、质子转移、电子离域和静电相互作用等信息，碱水合团簇是研究上述问题及结构演变规律的理想模型。然而，中性团簇因缺乏电荷而难于探测和质量选择，导致中性碱水合团簇的精密光谱研究长期受限于尺寸选择的技术瓶颈。

本工作中，团队利用基于IR-VUV技术的中性团簇红外光谱实验站，结合桌面极紫外光源，测定了中性碱水合团簇BaOH(H2O)n（n=1至5）的红外光谱。团队将实验光谱与量子化学谐性计算和分子动力学非谐振动模拟相结合，发现当水合数n为1和2时，水分子通过O-H?O氢键直接与BaOH相作用，Ba与OH未解离；当n大于等于3时，Ba与OH发生解离，形成溶剂共享离子对结构。电子结构分析表明，随着水分子数目的增加，电荷转移降低了静电吸引力，氢键网络的形成促进了Ba与OH的解离，揭示了碱溶解过程的微观机制。

该体系可作为描述开壳层实体与水分子之间静电和诱导效应相互作用的模型，为理解各种闭壳层体系的早期溶剂化过程提供了新的策略。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/jacs.5c15032

作者：江凌等 来源：《美国化学会志》

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