科研人员观测到含有玻璃态关键结构单元的中性氧化硼团簇

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/39575.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！

氧化硼（B_2O_3）广泛应用于玻璃、光学材料和高能推进剂等领域，在常压下以玻璃态形式存在。玻璃态氧化硼模型被认为是由特定结构单元组成的二维网络，但其结构表征和生长机制仍不明确。研究氧化硼团簇结构的演化，对理解玻璃态物质的生长机制和成键特征具有重要意义。然而，与离子型氧化硼团簇相比，中性氧化硼团簇不带电荷，难于探测和质量选择，实验研究更具挑战性。因此，实现中性氧化硼团簇的精准光谱表征是研究人员长期以来的目标之一。

近日，中国科学院大连化学物理研究所等科研团队，利用大连相干光源观测到含有玻璃态关键结构单元的中性氧化硼团簇，为理解玻璃态物质的微观结构和生长机制提供了新思路。

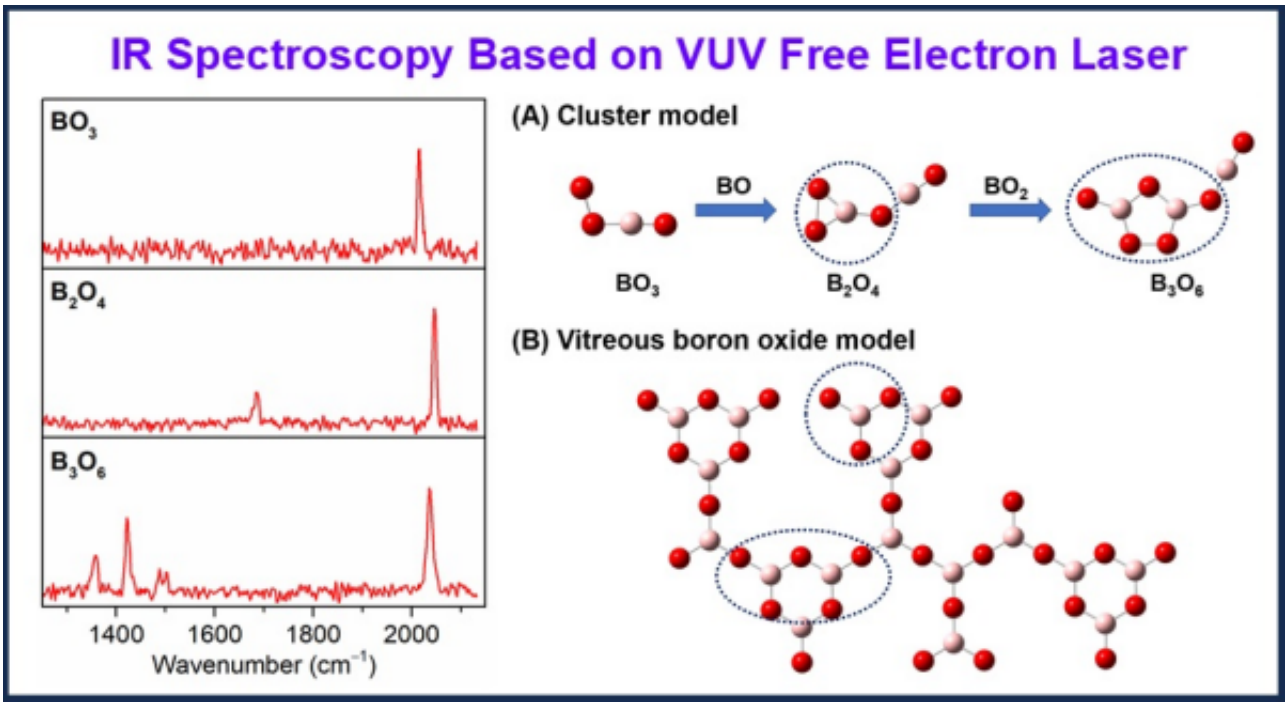
为实现对中性团簇的精准探测和结构解析，团队自主开发了基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验站，实现了质量选择中性团簇的高灵敏谱学探测、结构表征和反应性能研究。结合大连相干光源和桌面极紫外光源，该实验站已被用于水团簇、金属—水团簇、硼团簇等体系的中性团簇光谱研究。

科研人员利用基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验站，测定了一系列中性氧化硼团簇（BO_3、B_2O_4和B_3O_6）的尺寸选择红外光谱。团队将实验光谱与量子化学理论计算相结合发现，BO_3、B_2O_4和B_3O_6团簇均具有平面结构，分别由BO、BO_3和B_2O_5基团组成，而这些基团正是构成玻璃态二维网络的关键结构单元。化学键分析表明，这些团簇平面结构的高度稳定性源于端基B≡O和B－O σ键之间的协同作用。

该研究为体相材料的关键结构单元提供了光谱特征，也为系统研究氧化硼材料的逐步形成和生长机制提供了新策略。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（*Journal of the American Chemical Society*）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、科学技术部、中国科学院等的支持。

论文链接



科研人员观测到含有玻璃态关键结构单元的中性氧化硼团簇

研究团队单位：大连化学物理研究所

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