

---

# 大连化物所等在酸解离机理研究中取得新进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/4837.html>

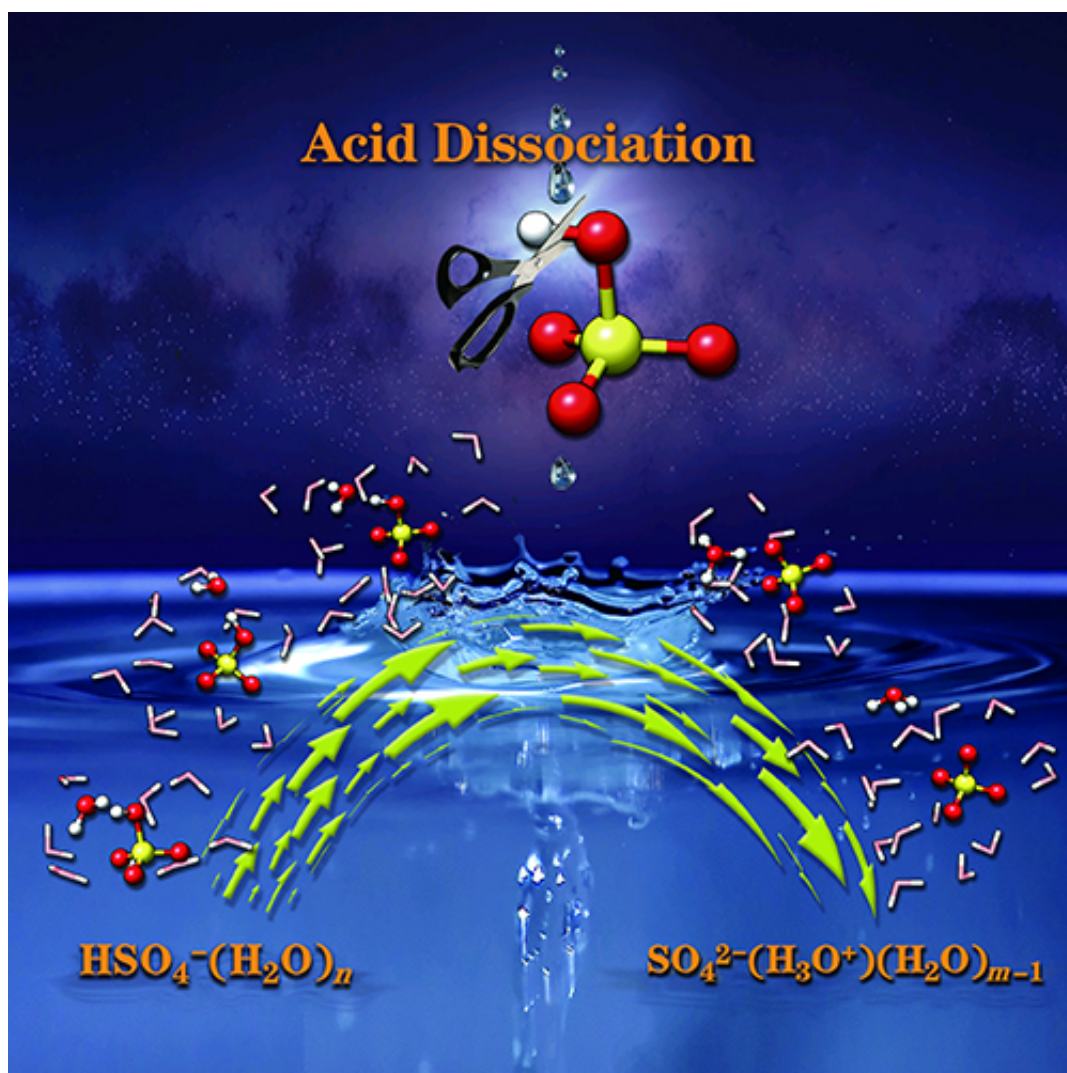
**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

大连化物所等在酸解离机理研究中取得新进展。近日，中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室团簇光谱与动力学研究组(1112组)研究员江凌与香港中文大学教授刘志锋合作，在酸解离机理研究中取得新进展，相关成果发表在The Journal of Physical Chemistry Letters上。

酸解离反应是溶液相的基本反应之一，在许多化学和生物等过程中起着非常重要的作用。然而，凝聚相存在大量团簇，结构复杂，解释“需要多少个水分子才能使酸发生解离”等基本科学问题仍然是一个严峻的挑战。

硫酸( $\text{H}_2\text{SO}_4$ )是一种活泼的二元无机强酸。在本工作中，双方研究人员以 $\text{HSO}_4^-(\text{H}_2\text{O})_n$ 作为模型体系，利用分子动力学模拟与红外光解离光谱相结合的方法，研究了酸解离的动力学机理。结果表明，当 $n=12$ 时， $\text{HSO}_4^-$ 开始发生部分解离;当 $n=16$ 时， $\text{HSO}_4^-$ 已经完全解离，形成了水合质子与共轭碱的离子对团簇，即 $(\text{SO}_4^{2-})(\text{H}_3\text{O}^+)(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ ; $\text{SO}_4^{2-}$ 和 $\text{H}_3\text{O}^+$ 离子对与水分子形成了更强的氢键，使得溶剂壳层变得更加紧凑，这解释了红外光解离光谱实验发现的 $\text{S}=\text{O}$ 伸缩振动显著变宽现象。该项研究从分子水平上揭示了酸解离的深层次机理，为理解质子转移和离子对溶剂化动力学机理提供了新的思路。

该研究工作得到国家自然科学基金科学中心项目、面上项目，中科院战略性先导科技专项(B类)，大连光源专项基金等资助。



大连化物所等在酸解离机理研究中取得新进展

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](http://www.iikx.com)转发