
大连化物所发现植物防晒分子新的激发态超快能量弛豫机理

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6662.html>

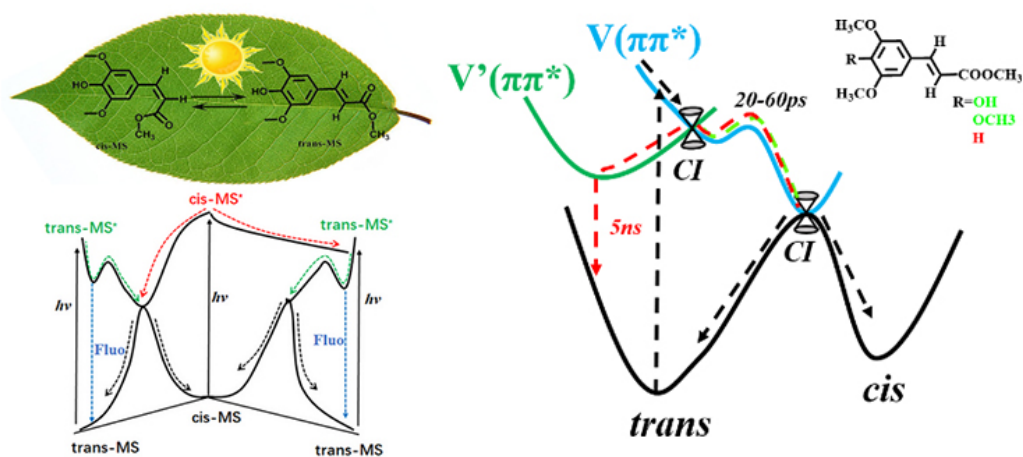
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

大连化物所发现植物防晒分子新的激发态超快能量弛豫机理。近日，中国科学院大连化学物理研究所复杂分子体系反应动力学研究组研究员韩克利团队发现了植物防晒分子新的激发态超快能量弛豫机理。

十字花科植物的叶片表面均匀分布着一层反式构型的苹果酸芥子酯类似物，可以将具有破坏性的紫外线能量，在几十个皮秒内通过光致顺反异构转化为无毒无害的热能，同时生成大量顺式产物(JPCL, 2017)。生成的大量顺式产物在防晒分子整体的防晒效果中也有着重要的作用，然而顺式产物在吸收紫外线后的光物理和光化学过程却不清楚。有鉴于此，该研究团队以最小的芥子酸酯 methyl sinapate (MS)为模型，通过飞秒瞬态吸收光谱技术和含时密度泛函等多种理论方法，首次研究了顺式MS的光动力学行为。研究人员发现顺式结构在激发态时，一部分分子会通过反式结构类似的过程通过非绝热弛豫的方式回到基态，但是另一部分激发态分子会经过绝热弛豫的方式生成反式结构的激发态分子，然后再通过非绝热的方式回到基态。对顺式构型的研究进一步加深了人们对植物防晒分子的机理及光致异构化动力学的认识，相关工作发表在《物理化学快报》(The Journal of Physical Chemistry Letters)上。

为进一步开发更加有效的防晒分子，构建分子结构和性能之间的关系，研究团队将反式MS的对位羟基进行化学修饰，并研究它们的超快激发态动力学。研究发现，当对位上没有取代基时，紫外光直接激发的 $V(\pi\pi^*)$ 态的弛豫过程中，会有暗态 $V'(\pi\pi^*)$ 的参与，该态主要通过辐射荧光的方式回到基态，寿命长达5纳秒。而 $V(\pi\pi^*)$ 态通过光致异构化进行非辐射弛豫，寿命仅为20皮秒。暗态 $V'(\pi\pi^*)$ 的参与会使激发态能量弛豫的效率大大减低，可能会增加有害副反应发生的几率。这是首次在实验上对 $V(\pi\pi^*)$ 和 $V'(\pi\pi^*)$ 态进行完整区分，加深了人们对包括芥子酯在内的多种肉桂酸衍生物的光致异构化动力学的认识，同时表明当开发芥子酯类的防晒分子时，应当避免 $V'(\pi\pi^*)$ 态的参与。相关工作发表在《物理化学快报》(The Journal of Physical Chemistry Letters)上。

上述工作得到国家自然科学基金重点项目等资助。



大连化物所发现植物防晒分子新的激发态超快能量弛豫机理

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](https://www.iikx.com)转发