
大连化物所发展基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验方法

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/8280.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！

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研究员江凌、中科院院士杨学明、张东辉团队，与清华大学教授李隽合作，在中性水团簇研究方面取得新进展，发展了基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验方法。

团簇在能源催化和大气雾霾等诸多化学过程中广泛存在，团簇表征与性能研究对诠释化学反应机理至关重要。目前，离子团簇研究居多，而中性团簇由于缺乏电荷、难于探测，相关实验研究甚少，其瓶颈主要在于缺乏合适的紫外光源。2017年建成的大连相干光源，是目前世界上唯一工作在极紫外波段的自由电子激光用户装置，具有高亮度和脉冲时间特性，可以有效地实现单光子阈值电离，非常适合用于中性分子和团簇的高灵敏度和高时间分辨的探测和研究。

鉴于上述情况，江凌和杨学明团队，发展了基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验方法，用于质量选择中性团簇的高灵敏探测、结构表征和性能研究。

水是生命之源，水分子二聚体 ($(\text{H}_2\text{O})_2$)

) 是研究冰和液态水氢键作用机制的

模型体系。然而， $(\text{H}_2\text{O})_2$

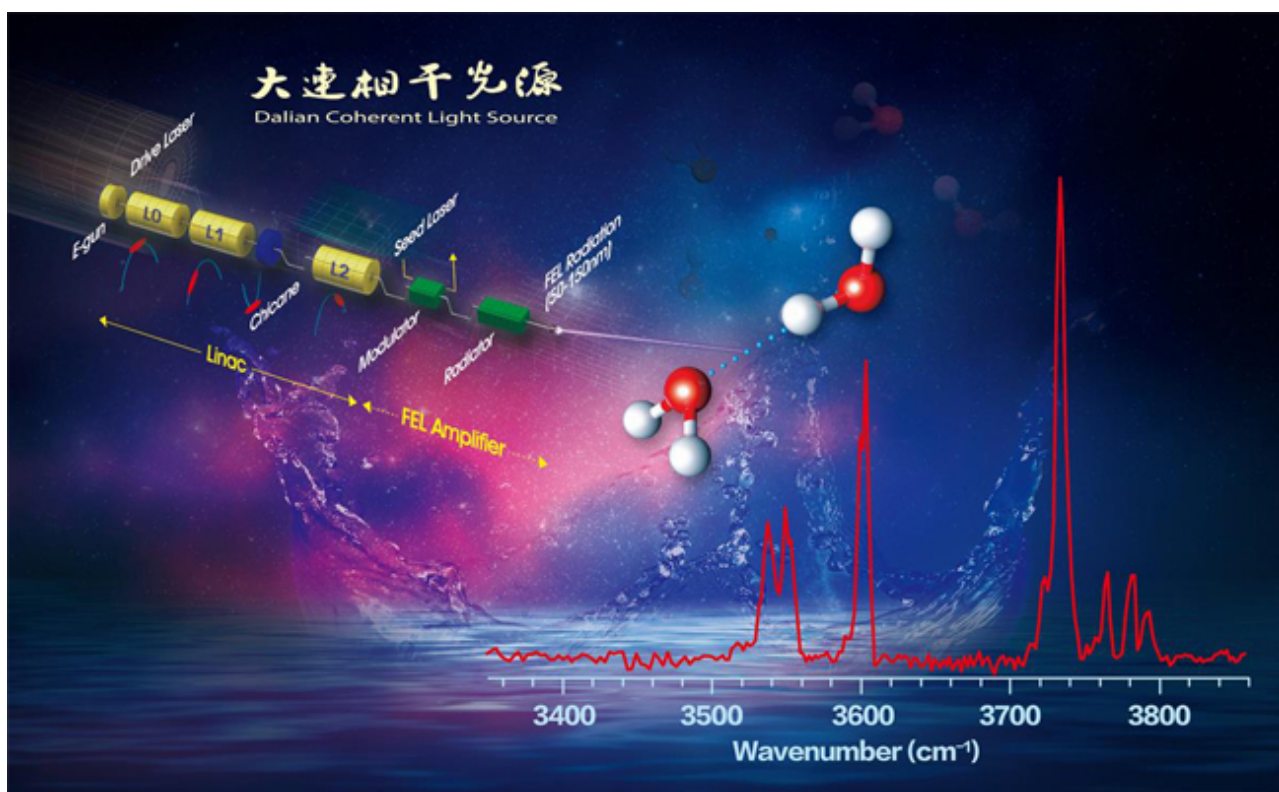
的红外光谱指认仍然存在争议。在本工作中，江凌和杨学明团队利用自主研制的基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验站，对 $(\text{H}_2\text{O})_2$

中性团簇展开了详细的研究，发现了分辨较好的四组谱峰；张东辉团队利用自行发展的全维势能面动力学方法，计算了红外谱图，将这四组谱峰精确地指认为不同化学环境下的OH伸缩振动模式；李隽团队利用分子轨道理论，剖析了成键特性，诠释了OH伸缩振动的分布规律。这些研究成果有助于理解复杂体系的红外光谱及结构特征。

由于大连相干光源的波长范围涵盖了绝大多数中性分子和团簇的第一电离势，因此，该工作为中性团簇结构与性能、催化反应中间体和自由基的探测、气溶胶成核机制、生物分子表征等领域的前沿科学研究提供了新的策略。

相关成果发表在《[物理化学快报](#)》(The Journal of Physical Chemistry Letters

)上。该工作得到国家自然科学基金委动态化学前沿研究中心项目、中科院战略性先导专项(B类)“能源化学转化的本质与调控”、自然科学基金面上项目、大连化物所大连相干光源专项基金等资助。



大连化物所发展基于大连相干光源的中性团簇红外光谱实验方法

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/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发