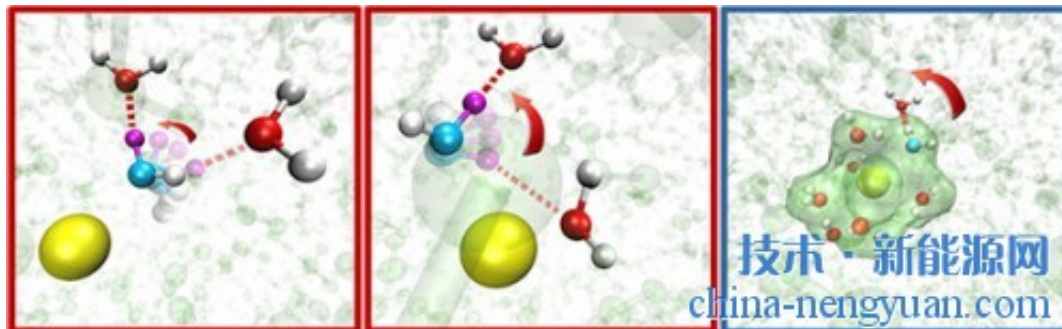


## 福建物构所等在离子溶液水分子动力学研究中取得进展



溶液中的离子与溶剂的相互作用是一个在能源、催化、材料、医药等许多国民经济重要领域受到广泛关注的基本科学问题。例如，新近出现的水基碱金属离子电池使用高浓度的离子水溶液作为电解液，与常规离子蓄电池相比，更加安全，价格更低廉，效率更高。深刻理解溶液中离子与周围水分子之间的相互作用和关联，对深刻理解电池中电极界面电化学和电荷运输效率的分子机制，并进而设计更为高效的电池，具有至关重要的指导意义。又如在许多均相或固液非均相催化反应体系中存在各种离子配体(例如I<sup>-</sup>等)，不同条件下同一种离子对功能基元中发生的反应能够起到从毒化到促进的各种截然不同的作用。对这些作用的结构成因的微观描述，对理解功能基元的作用机理及其相互协同机制意义重大。

在对溶液离子效应的研究中有一个极具争议的基本问题，即如何理解阳离子对水分子动力学行为的影响。对于这一问题，各种不同的实验手段往往给出不同的图像。例如，对于Na<sup>+</sup>和K<sup>+</sup>这两种极其相似的碱金属离子，中子散射实验测量到它们对水具有类似的结构破坏作用，因而认为它们都会使水的转动运动加快；而核磁共振与超快激光光谱动力学实验则检测到Na<sup>+</sup>会减慢，而K<sup>+</sup>会加速水分子旋转。对这一问题的深刻理解由于这两种碱金属离子在能源、电化学和生命科学中的显著作用而变得尤为重要。

在中国科学院战略性先导科技专项、国家自然科学基金重点与面上项目的资助下，中科院福建物质结构研究所结构化学国家重点实验室庄巍课题组通过与北京大学超快激光光谱学实验团队的合作，在理论上解释了上述矛盾现象的成因。在大规模经典与量子分子动力学模拟计算的基础上，结合Extended Ivanov Jump理论解析模型，他们发现这两种离子都会由于破坏水的氢键而加速相邻水分子的大幅角跳跃旋转，与中子散射实验结果一致。另一方面，它们对于水分子的扩散动力学却有着不同的影响：Na<sup>+</sup>会减慢水的扩散旋转，而K<sup>+</sup>则会促进这一旋转，与动力学实验结果一致。上述结论为解释两类实验观测论断之间的明显矛盾提供了合理的图像，相关研究成果发表在《化学科学》(Chemical Science)杂志上(DOI:10.1039/C6SC03320B)。

这一工作是该课题组自2010年起在这一方向上系列相关研究的最新进展，之前的研究成果包括与超快光谱学实验结合发现即使在较低浓度的强电解质溶液中仍存在着离子团簇化现象(PNAS 108,4737, 2011)，并由于这一发现对于教科书中的经典图像的颠覆性意义而被《科学》杂志专文报道(DOI: 10.1126/science.331.6024.1495-a)。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/100635.html>