



公告:

中国

### 新闻动态

您现在的位置: [首页](#) > [新闻动态](#) > [科研动态](#) 图片新闻 综合新闻 学术活动 科研动态

### 邮箱登陆

用户名: 密码: 

### 信息化工作

 信息化组织体系 信息化规章制度 信息化动态

### 科研成果

[概况介绍](#)[获奖信息](#)[论文](#)[专著](#)[专利](#)

## 青海盐湖所在溶液结构的中子散射研究上取得新进展

2020-02-27 | 编辑: 盐湖资源化学实验室 | [【大】](#) [【中】](#) [【小】](#) [【打印】](#) [【关闭】](#)

长期以来,液体结构一直是物理和化学领域的研究难点。X射线散射作为可直接获得溶液结构信息的重要方法,在针对多组分弱散射能力样品如硼酸盐、含锂/含氢化合物等的液态结构研究上仍面临着诸多困难。例如,晶体结构中二氢键和阴离子水合细节已比较明确。然而,关于溶液状态下的二氢键和阴离子水合细节却鲜有直接实验证据。近日,青海盐湖所盐湖资源化学实验室溶液结构课题组与日本福冈大学Yamaguchi研究组合作,利用日本J-PARC散裂中子源和英国ISIS散裂中子源在这一问题上取得了一些新进展。

众所周知,X射线对氢、硼等轻原子散射能力非常低。而中子散射对轻原子非常敏感,尤其是用D取代H,用<sup>11</sup>B取代B,其散射能力远远超出X射线散射。针对溶液中的二氢键这一科学问题,课题组同时用X射线、中子散射及基于Mote Carlo 模拟的EPSR精修,研究了氘代硼氧化钠碱性氘代水溶液结构,精确获得了NaBD<sub>4</sub>溶液中二氢键的数量与取向,首次给出了水溶液中二氢键的直接实验证据。同时,借助DFT 计算和波函数分析阐述了二氢键的强度和本质,该成果发表在最新一期*The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2020, 1622. (IF=7.329, <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcllett.9b03183>)。

针对四羟基硼酸钾溶液结构研究,课题组采用X射线及中子散射研究了K<sup>11</sup>B(OD)<sub>4</sub>的二氘代水、一氘代水和水溶液的结构,获得了溶液中硼酸根阴离子的水合及其缔合结构信息,研究成果发表在最新一期*Analyst* (IF=4.019, <https://pubsrsc.xilesou.top/en/content/articlelanding/2020/an/c9an01662g>),进一步研究结果将陆续发表。

同时,课题组近来还与北京化工大学张焜宏教授团队合作,在中国科学院仪器设备功能开发技术创新项目的支持下,依据盐湖卤水蒸发浓缩和稀释溶解的原理,搭建了湿度可控的微液滴原位Raman光谱系统。该系统进一步扩展了盐水溶液的浓度范围,为认识过饱和溶液中离子缔合规律、结晶成盐规律提供了新的途径。相关研究成果已陆续在*J. Raman spectrum.*, *Spectrochimica Acta Part A* 等刊物上发表研究成果数篇。

目前,在国家自然科学基金、青海省科学技术厅等项目的支持下,青海盐湖所溶液结构课题组还正围绕硼酸盐溶液结构与介稳现象、受限盐水溶液结构及相变性能、硼酸盐非晶体系结构及盐湖吸附萃取实际体系中的溶液结构等开展进一步的研究工作。

