

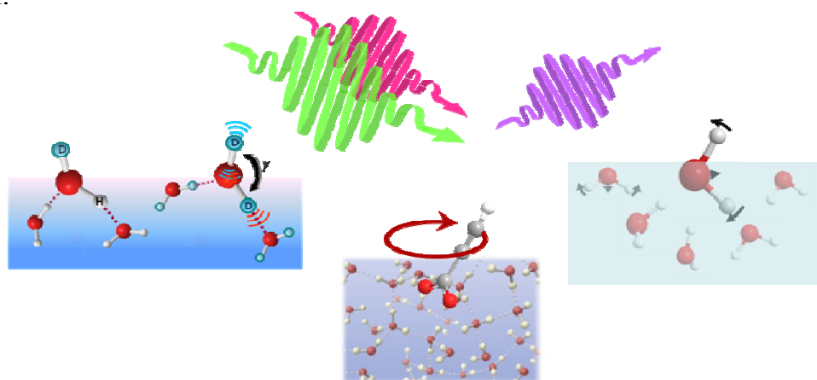
Александр Бендерский,
Department of Chemistry, University of Southern California, Los Angeles, CA, USA

Структура и динамика водородных связей на поверхности воды

Сеть водородных связей - это фундаментальная структура которая определяет практически все микроскопические и макроскопические свойства воды: плотность, вязкость, поверхностное натяжение, сольватацию и гидратацию, аномальные температурную зависимость многих параметров, а также гидрофильные/гидрофобные взаимодействия ведущие к самоорганизации биологических структур.

В этом докладе я расскажу о серии работ изучающих водородные связи на поверхности вода/воздух посредством нелинейной колебательной спектроскопии. Собственные колебания молекулы воды (валентное O-H и деформационное H-O-H) были использованы для измерения силы и структуры локальных водородных связей. Частота валентного колебания уменьшается (red-shift), в то время как частота деформационного колебания увеличивается (blue-shift) с увеличением силы водородных связей. Новые экспериментальные методики поверхностно-селективной спектроскопии (генерация суммарной частоты, SFG, и спектральная интерферометрия) были развиты для измерения формы спектральных линий. Я также представлю теоретические разработки и результаты по вычислениям спектров на основании компьютерного моделирования молекулярной динамики воды.

Мы также рассмотрим измерения вращательной релаксации молекул на поверхности воды, связанной с локальной (микроскопической) "вязкостью" (а точнее, с динамикой разрыва и образования водородных связей). Мы разработали новую теоретическую модель для анализа формы спектральных линий SFG в рамках вращательной диффузии. Измеренные спектры молекулы пропиолевой кислоты показывают что эта молекула вращается в 3 раза быстрее на поверхности вода/воздух чем в объеме воды.



Vinaykin, M., Benderskii, A.V. "Vibrational Sum-Frequency Spectrum of the Water Bend at the Air/Water Interface" *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, 3348-3352 (2012)

Stiopkin, I.V.; Weeraman, C.; Pieniazek, P. A.; Skinner, J.L.; Benderskii, A.V. "Hydrogen bonding at the water surface revealed by isotopic dilution spectroscopy", *Nature* **474**, 192-195 (2011)

Stiopkin, I. V., Jayathilake, H. D.; Benderskii, A.V. "Temporal Effects on Spectroscopic Line Shapes, Resolution, and Sensitivity of the Broad-Band Sum Frequency Generation" *J. Chem. Phys.* **132**, 234503, 1-9 (2010)

Stiopkin, I. V., Jayathilake, H. D.; Bordenyuk, A. N.; Benderskii, A.V. "Heterodyne-detected Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy", *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 2271 -2275 (2008)