

新闻

- > 图片新闻
- > 分院要闻
- > 中科院
- > 工作动态
- > 科研进展
- > 院地合作
- > 学术交流
- > 媒体聚焦
- > 视频新闻
- > 通知公告
- > 党的建设
- > 人事教育

首页 >> 新闻 >> 科研进展

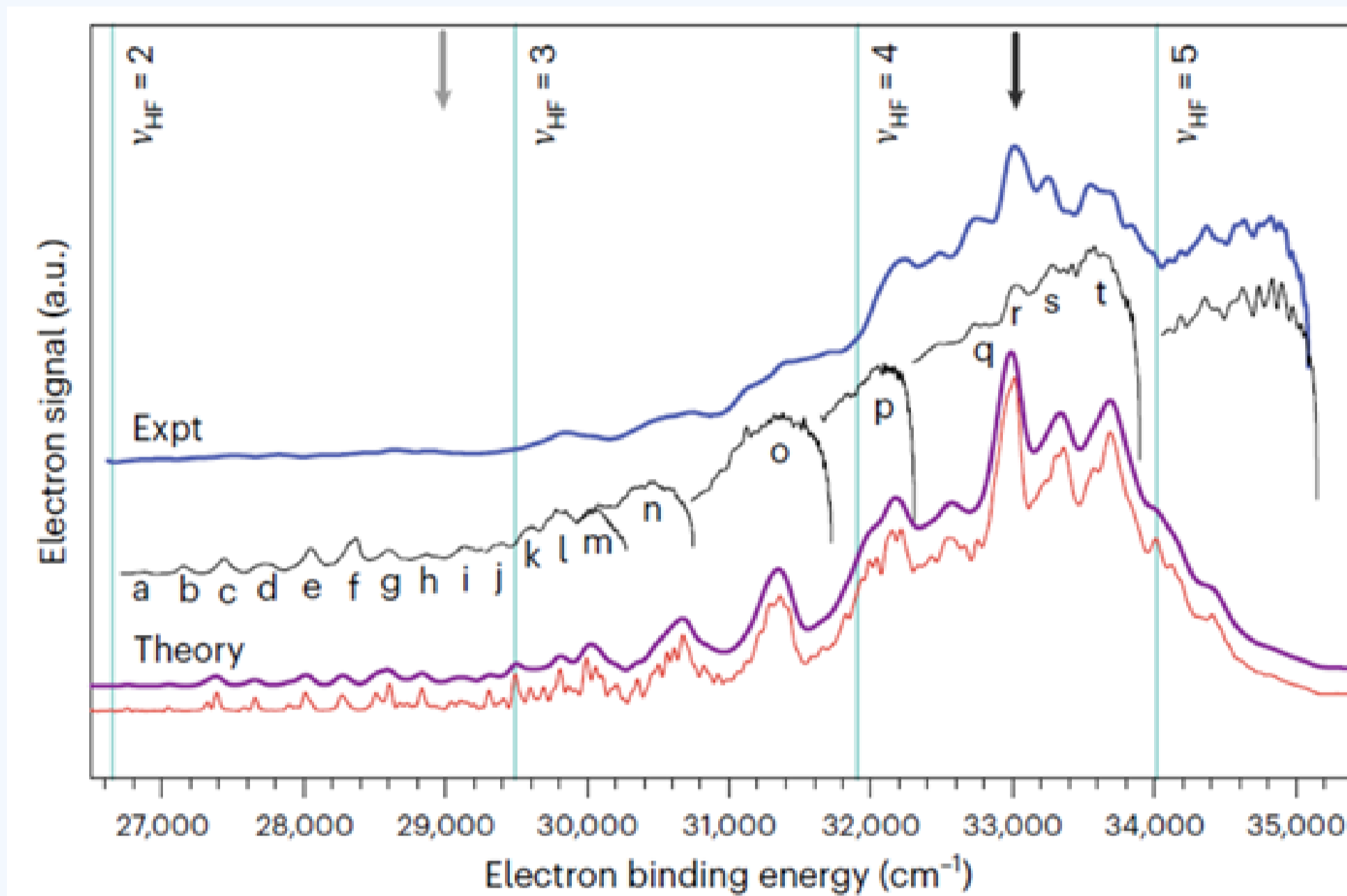
科研进展

精密测量院等在多原子分子反应过渡态光谱研究中取得新进展

发表日期: 2022-12-15 来源: 精密测量科学与技术研究院 浏览量: 73 【放大 缩小】

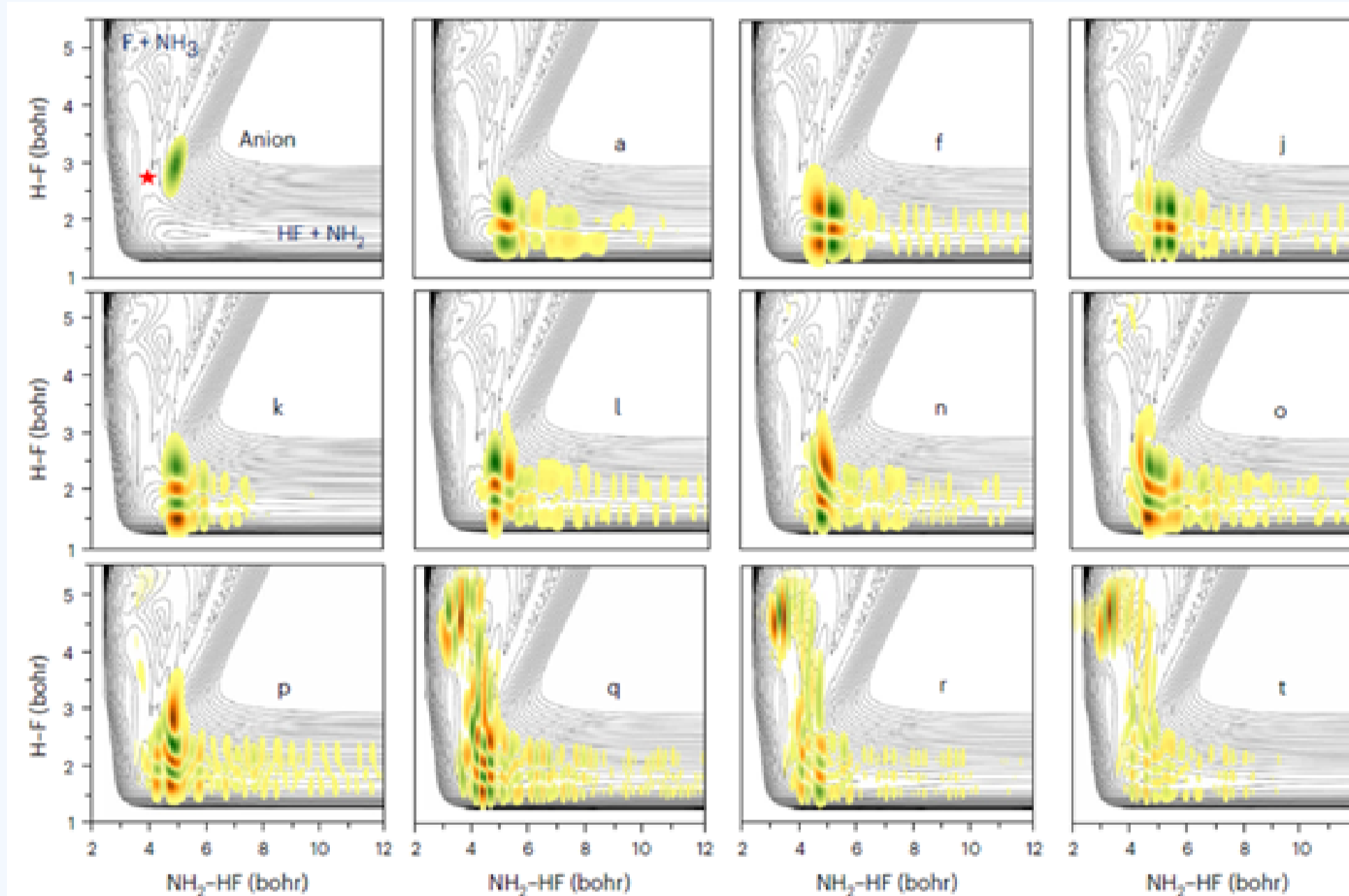
近日,精密测量院理论与计算化学研究组宋宏伟与美国加利福尼亚大学伯克利分校教授Daniel M. Neumark团队、新墨西哥大学教授郭华合作,结合慢光电子速度成像光谱实验和量子动力学理论,获得了多原子分子反应过渡态区域目前最为完整的图像,对于理解多原子分子反应的反应机理具有重要意义。相关研究成果发表在国际学术期刊《自然-化学》杂志上。

化学反应过渡态决定了化学反应的基本特性。对于多数化学反应,反应过渡态的寿命非常短,实验观测非常困难,因此,直接观测反应过渡态被认为是化学研究中的一个“圣杯”。共振态是反应体系在过渡态区域形成的具有一定寿命的准束缚态,它为研究化学反应在过渡态附近的行为提供契机,因而可以通过研究共振态的结构与动力学揭示化学反应的微观机理。



实验测量与理论计算的F-NH₃光脱附谱

该工作结合慢光电子速度成像光谱实验和量子动力学理论,观测到多原子分子反应 $F + NH_3 \rightarrow HF + N$ H_2 过渡态区域的多个振动Feshbach共振峰(图1)。共振波函数表明这些Feshbach共振态位于产物端势阱、过渡态和反应物端势阱等区域(图2),成由于单个或多个反应体系振动模式的激发。由于部分Feshbach共振态的能量高于反应物势能,因而可能影响化学反应的速率和量子态分布。本研究获得了多原子分子反应过渡态目前最完整的图像,表明过渡态光谱方法已经具备探究多原子分子反应过渡态区域复杂动力学行为的能力。



F-NH₃负离子基态与不同Feshbach共振态波函数的分布

Feshbach共振态是一种很特殊的量子动力学现象,其标记依赖精确的量子动力学计算。宋宏伟副研究员从2016年开始就致力于开发计算五原子分子体系光电谱的理论方法,提出了高精度势能面的构建方法(J. Phys. Chem. A 126, 352 (2022))和精确的量子动力学计算方法(Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 22298 (2021)),为标记实验光电谱和理解多原子分子反应微观机理打下良好的理论基础。

相关研究成果以“Observation of resonances in the transition state region of the $F + NH_3$ reaction using anion photoelectron spectroscopy”为题发表在国际著名学术期刊《自然-化学》杂志上。在本项工作中宋宏伟负责理论计算与分析,宋宏伟和Neumark教授为共同通讯作者。

该研究得到了基金委创新研究群体项目和面上项目的资助。

论文链接: <https://www.nature.com/articles/s41557-022-01100-1>