

---

# 合肥研究院等在过氧自由基的同分异构体检测研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12148.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，中国科学院合肥物质科学研究院安徽光学精密机械研究所基础科学研究中心研究员张为俊课题组在过氧自由基（ $RO_2$ ）的同分异构体检测研究中取得进展。相关研究成果以Identifying isomers of peroxy radicals in the gas phase: 1- $C_3H_7O_2$  vs 2- $C_3H_7O_2$ 为题，在线发表在Chemical Communications上。

$RO_2$ 是大气氧化反应中重要的中间体，在大气复合污染形成过程中扮演关键角色，其与 $NO_x$ （NO和 $NO_2$ ）和 $HO_x$ （ $HO_2$ 和OH）等之间的反应与大气中臭氧及二次有机气溶胶的生成密切相关。大气 $RO_2$ 种类多、结构复杂，如何在线检测出不同种类的 $RO_2$ 并区分其同分异构体具有技术挑战性。

张为俊课题组的副研究员唐小锋与法国SOLEIL国家实验室、皮埃尔和玛丽居里大学（Universit e Pierre et Marie Curie）开展国际合作，通过建立微波放电流管反应装置，开展大气 $RO_2$ 化学反应动力学研究，结合同步辐射真空紫外光电离符合质谱技术，实现了自由基反应关键物种（包括反应物、自由基和产物）的全面、在线检测。

$RO_2$ 电离生成的分子离子一般不具有稳定结构，会解离生成R自由基离子碎片和氧气，这是其光电离检测的难点。研究人员通过改变光子能量，检测R自由基的电离能、R离子碎片的出现势，根据其能量不同，区分R自由基的电离和 $RO_2$ 离子的解离过程，实现对 $RO_2$ 的有效检测。

研究人员通过扫描同步辐射光子能量，测量获得具有质量选择的超高分辨光电子谱，结合高精度的量子化学理论计算，准确辨认出丙基过氧自由基的1- $C_3H_7O_2$ 和2- $C_3H_7O_2$ 同分异构体，以及它们的G、 $G_1T_2$ 、 $G_1G_2$ 和 $G_1'G_2$ 等旋转构象体，为深入研究大气过氧自由基化学反应提供了重要数据和检测方法。

研究工作得到国家自然科学基金委重大研究计划重点项目、面上项目和中科院国际合作重点项目的支持。

[论文链接](#)

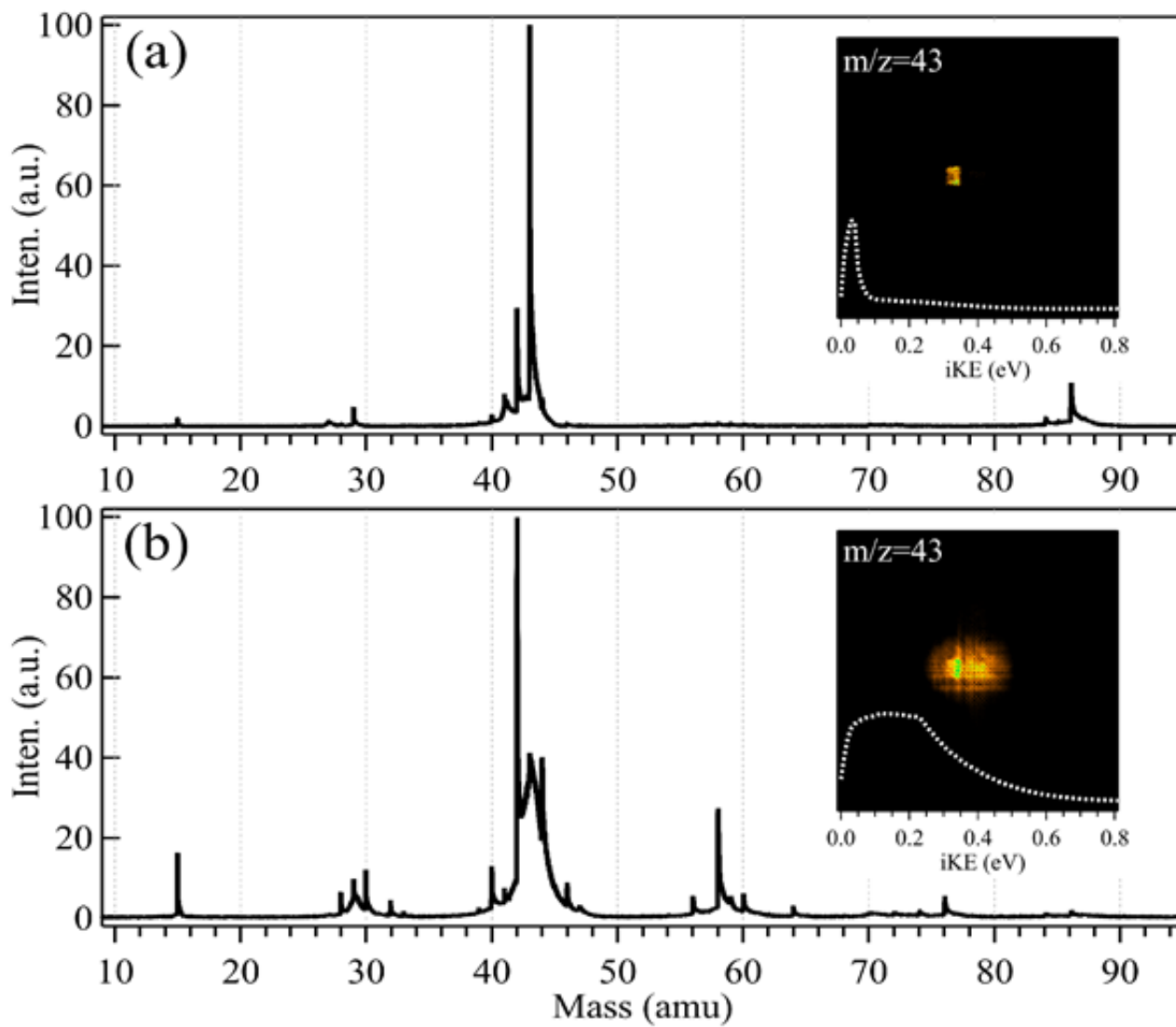


图1.光电离质谱实现反应物、中间体及产物的全面检测

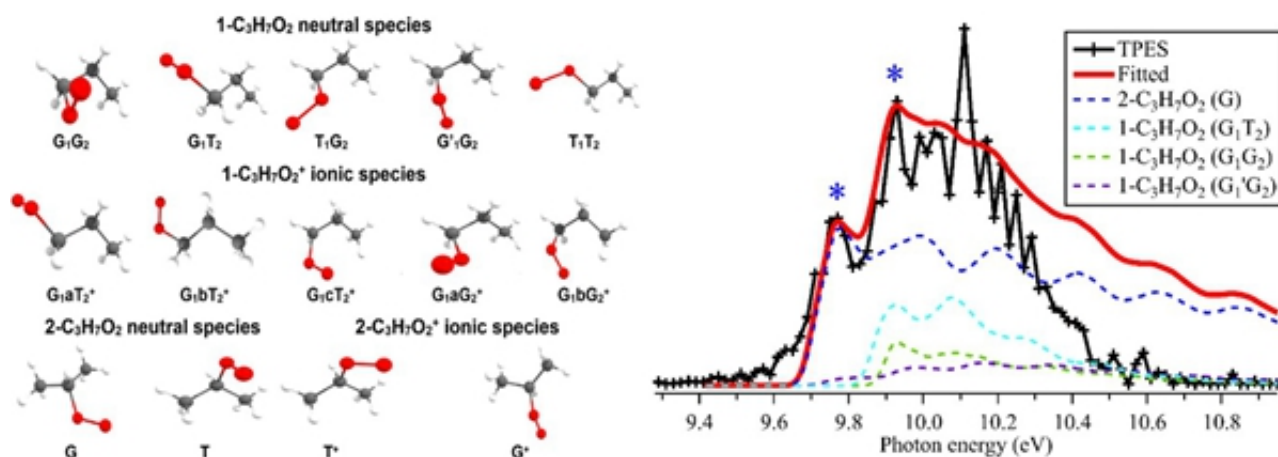


图2.丙基过氧自由基的结构及其高分辨光电子谱

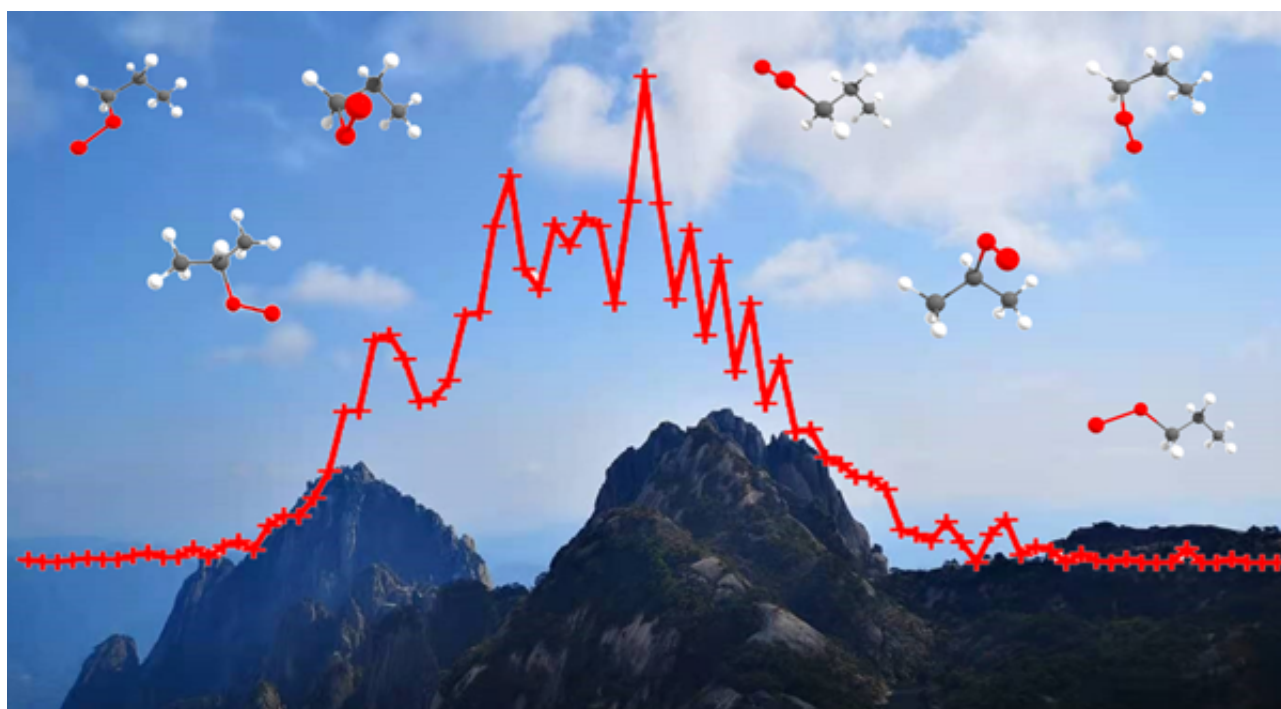


图3.高分辨光谱实现过氧自由基同分异构体及其旋转构象体的检测区分

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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