
科学家揭示化学反应中的“双漫游”机理

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13906.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！

科学家揭示化学反应中的“双漫游”机理。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员傅碧娜、张东辉院士团队与大连理工大学教授韩永昌合作，发现了化学反应中的双漫游机理。相关研究成果发表在《物理化学快报》上。

漫游机理是化学反应中不寻常但很有趣的机理，该机理会得到意想不到的产物，并且产物末态分布与传统的最小能量路径呈现的分布完全不同。尽管漫游机理在单分子解离和双分子碰撞反应中都有发现和报道，但在同一反应中的多重漫游途径很罕见。

研究中，通过构建基于基本不变量—神经网络的高精度全维势能面和动力学计算，研究人员在氢（H）和乙炔（C₂H₂）反应生成氢气和乙炔基（C₂H）的反应中发现了双漫游机理，即该反应的络合物乙烯基（C₂H₃）并没有解离成H原子和C₂H₂，但并没有解离，分离的H原子在C₂H₂附近徘徊，最终从C₂H₂提取H原子生成H₂，该路径被命名为C₂H₂促进的漫游；另一个漫游机制为H原子从最初形成的C₂H₃迁移，随后C₂H₃即将解离成H原子和亚乙烯基（H₂CC），出去的H原子在H₂CC周围漫游，最后从H₂CC中抽取另一个H原子，该路径被命名为H₂CC促进的漫游。在高碰撞能下，双漫游途径约占H₂+C₂H产物总积分截面的95%，其中C₂H₂促进的漫游途径占89%，H₂CC促进的漫游途径占6%。两种漫游路径都产生了高内能激发的C₂H产物，而通过常规过渡态的直接抽取路径则产生较冷的C₂H。该研究的计算结果为C₂H₂和H₂CC两种异构体在化学反应动力学中的重要性，以及在该双分子反应中漫游动力学的实验研究提供了重要启示。（来源：中国科学报卜叶 付艳林）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c01045>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：傅碧娜等 来源：《物理化学快报》

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://iikx.com)转发