

多原子分子反应过渡态光谱研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/21249.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！

多原子分子反应过渡态光谱研究取得进展。

近日，中国科学院精密测量科学与技术创新研究院理论与计算化学研究组副研究员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、美国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，对于剖析多原子分子反应的反应机理具有重要意义。

化学反应过渡态决定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的“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，为探索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。

该研究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 $F + NH_3 \rightarrow HF + NH_2$

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。

Feshbach共振态是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。宋宏伟自2016年开始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)），为标记实验光电子谱和理解多原子分子反应微观机理打下良好的理论基础。

相关研究成果发表在《自然-化学》上。研究得到国家自然科学基金创新研究群体项目和面上项目的支持。

[论文链接](#)

F-NH₃负离子基态与不同Feshbach共振态波函数的分布

研究团队单位：精密测量科学与技术创新研究院

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发