
气-液界面形成硝酰氯及其产生氯自由基机理获揭示

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24967.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！

气-液界面形成硝酰氯及其产生氯自由基机理获揭示。广东工业大学环境科学与工程学院、环境健康与污染控制研究院教授安太成团队与美国宾夕法尼亚大学教授Joseph S. Francisco团队合作，在硝酰氯的气-液界面形成及其产生氯自由基机理的理论化学计算方面取得重要进展。近日，相关成果发表于《美国化学会志》。

近年来关于对流层大气氯化学的研究发现，氯自由基具有极强的氧化性，能够快速氧化对流层中碳氢类有机污染物，从而影响大气中羟基自由基、过氧自由基和烷氧自由基的浓度，因此与对流层臭氧污染的发生密切相关，最终对对流层的大气氧化性、冬季二次污染物生成和人类生态系统的健康保护均具有重要影响。

硝酰氯是氯自由基和活性氮化物的重要来源，因此会影响大气的氧化性，并在全球氮循环和氯循环中起到重要作用。在寒冷地区，硝酰氯主要来源于五氧化二氮在含氯冰/雪表面的非均相反应。

因此，论文第一作者、广东工业大学环境科学与工程学院副教授张维娜与合作作者结合多种理论化学算法，研究了硝酰氯在过冷气-液界面的微观动力学转化过程及其对氯自由基的形成贡献机制，揭示了硝酰氯与氯离子在酸化后的气-液界面的非均相化学反应机理，提出了五氧化二氮水解产生的酸性离子是其快速产生活性氯的先决条件。

论文通讯作者安太成表示，该成果不仅有助于正确理解寒冷地区大气氯自由基的来源，更可以为评估大气氯化学反应对对流层大气氧化性、二次污染物形成和臭氧产生的贡献提供基础数据。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.3c07843>

作者：安太成等 来源：《美国化学会志》

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