

科学家发现“漫游”机制主导的多原子分子反应

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/32459.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！

科学家发现“漫游”机制主导的多原子分子反应。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员傅碧娜、中国科学院院士张东辉团队在多原子碰撞反应机制研究方面取得新进展，发现在 $\text{Cl} + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{HCl}$ 反应中，占主导地位的机制为漫游机制，而非传统过渡态的直接抽取机制。相关成果发表在《自然-通讯》上。

长期以来，化学界普遍认为化学反应遵循传统过渡态理论，沿着最小能量路径进行。然而，近年来非传统反应途径如漫游机制逐渐受到关注。本工作聚焦的 $\text{Cl} + \text{C}_2\text{H}_2$ 反应在大气化学中具有重要意义，是乙炔在海洋和极地对流层的去除途径，也是平流层下部卤素原子的重要消耗途径。

研究团队利用自主开发的基本不变量-神经网络方法，构建了 $\text{Cl} + \text{C}_2\text{H}_2$ 反应的高精度全维势能面，并开展精确的动力学模拟。研究发现，一旦超过能量阈值， $\text{Cl} + \text{C}_2\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{HCl}$ 反应主要通过氯漫游和氢漫游两种机制进行（贡献接近100%），传统过渡态的直接抽取机制的贡献微乎其微。在氯漫游过程中，Cl原子与乙炔形成短暂的 $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}$ 加合物，随后Cl原子部分解离并在乙炔分子周围漫游，最终提取氢原子形成HCl。氢漫游机制则是氢原子先部分脱离，在 C_2HCl 中间体周围迁移，进而提取氯原子生成产物。通过对反应时间、产物角分布和能量分布的深入分析，研究团队进一步揭示了该反应中漫游机制占主导地位。

本工作不仅挑战了传统双分子反应理论，强调了在反应动力学研究中考虑非传统途径的重要性，还为准确预测反应速率常数、深入理解反应机制提供了新视角。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-025-58121-w>

作者：傅碧娜等 来源：《自然—通讯》

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