
电荷转移反应中转动传能动力学研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40547.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！

电荷转移反应中转动传能动力学研究获进展

。离子与分子碰撞引发的电荷转移，以及伴随的转动传能过程，广泛存在于星际介质、行星大气、等离子体等复杂的气相环境中。从分子层面对电荷转移和转动传能的动力学机理进行研究，对理解上述气相环境的物理化学性质及其演化规律具有重要科学意义。

中国科学院化学研究所自主研制并搭建了一套量子态选择的离子—分子交叉束装置，可对离子—分子反应开展“态—态”分辨的动力学研究。

此前，研究团队揭示了自旋—轨道态

选择的电荷转移反应 $\text{Ar}^+(\text{}^2\text{P}_{3/2})+\text{N}_2 \rightarrow \text{Ar}+\text{N}_2^+(\text{v}, \text{N})$

)在前向散射区域的反应机理，首次发现硬碰撞辉散射机理在该电荷转移反应中的作用。近日，团队通过改进实验装置、优化离子源产生方式，降低离子束源的动能展宽，获得了目前为止分辨率最高的产物散射图像，并首次在产物的后向散射区域观察到明显的双环结构。这表明，产物在后向的转动激发呈现双峰分布，即双转动虹现象。传统理论认为，双转动虹只出现于异核双原子分子的碰撞传能过程，这一现象拓展了传统转动传能理论的预测。

全维度轨线面跳跃计算结果与实验观测定性一致，证明该体系的双转动虹现象是由立体动力学效应控制的，而非绝热电荷转移过程产生。由于电荷转移过程各向异性，垂直碰撞（ $\theta=90^\circ$ ）和共线碰撞（ $\theta=0^\circ$ 或 180° ）使体

系在近距离时分别处于 Ar^++N_2 和 $\text{Ar}+\text{N}_2^+$

两个不同的电荷转移态，二者具有截然不同的短程各向异性相互作用势，这使它们经历完全不同的转动传能过程，并最终导致产物离子在后向散射区域呈现双转动虹现象。

该研究揭示了立体动力学调控的非绝热效应在离子—分子电荷转移和转动传能过程中的重要作用。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（Journal of the American Chemical Society）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、中国科学院等的支持。

[论文链接](#)

电荷转移反应 $\text{Ar}^+(\text{}^2\text{P}_{3/2}) + \text{N}_2 \rightarrow \text{Ar} + \text{N}_2^+(\nu, \text{N})$ 中的双转动虹现象

研究团队单位：化学研究所

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](http://www.iikx.com)转发