四原子反应微分立体动力学研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/43360.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！

四原子反应微分立体动力学研究取得进展
。分子反应动力学旨在揭示反应碰撞过程的详细机制，并最终实现对反应产物的调控。在量子态水平上制备反应物是实现这一目标的主要手段。除了将反应物制备于特定的内部量子态之外，进一步控制反应物的初始取向和排列，已成为动力学研究的前沿手段之一。该方法推动分子反应动力学朝着“ 完全控制反应物 ”的方向发展，并使立体动力学成为探测和操控化学反应的有力工具。

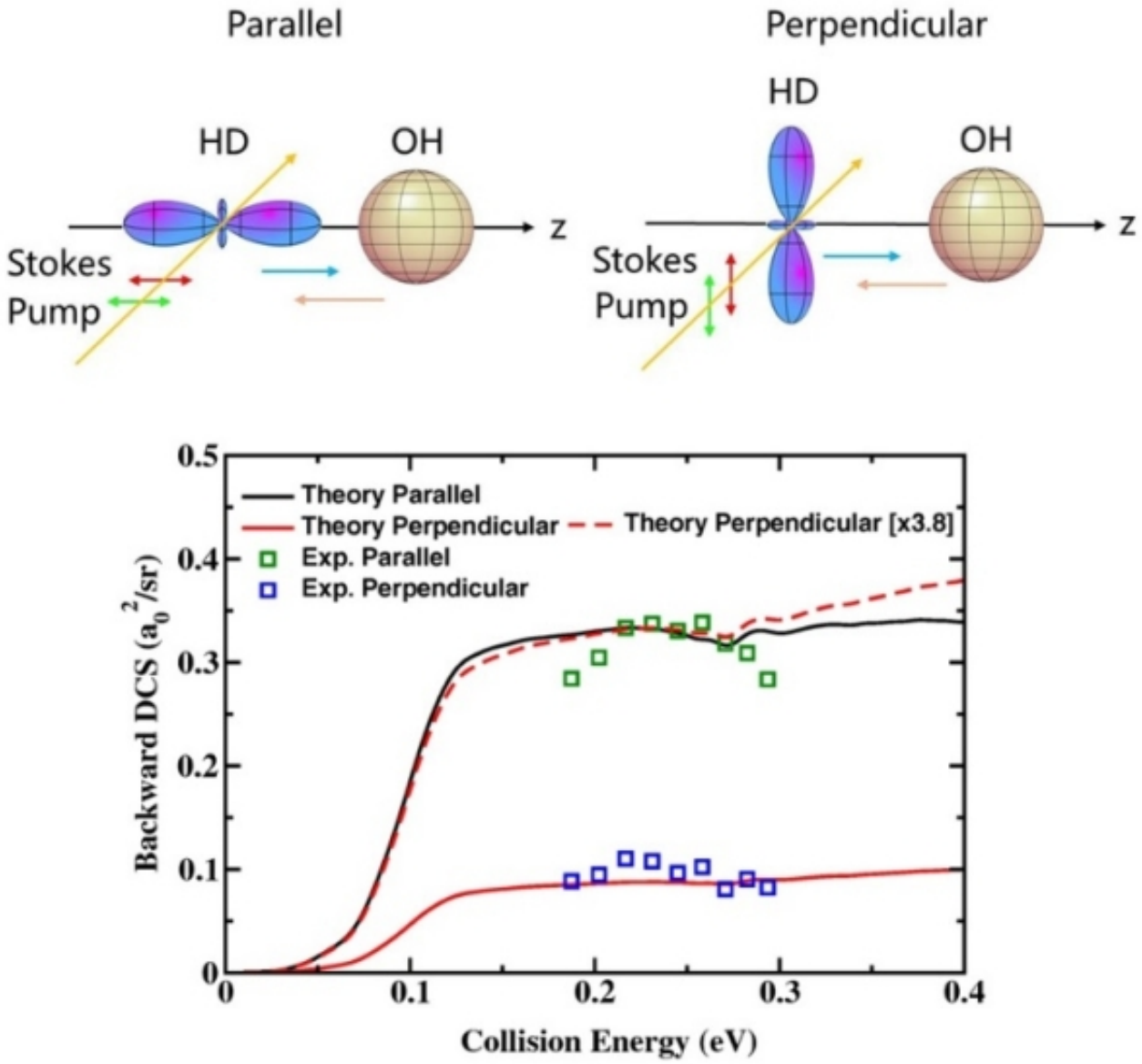
近日，中国科学院大连化学物理研究所科研团队在四原子反应的微分立体动力学研究中取得进展。团队结合高分辨的交叉分子束实验与全维量子动力学计算，研究了HD(v=1, j=2) + OH → D + H_2O反应，非极性的HD分子被制备在键轴平行或垂直于相对速度方向两种初始排列上。

实验和理论在后向散射谱和产物角分布中均观察到立体动力学效应，平行构型的后向散射强度是垂直构型的近3.8倍。散射波函数分析表明，初
始m=±2量子态（m
表示初始角动量j沿相对速度方向的投影）没有经过势能面上的静态过渡态，而是经由非共面的动力学过渡态。该过渡态中的非零二面角是三原子反应中不存在的几何自由度，它降低了反应活性，增强了侧向散射，同时使产物的振转态分布基本保持不变。此外，HD分子的初始排列信息被保留在产物H_2O的转动方向上。

该研究从实验和理论两方面剖析了分子—分子反应中的微分空间不对称，证明了反应物的取向排列可引导反应经由不同的动力学过渡态，从而控制反应途径。

相关研究成果发表在《美国国家科学院院刊》（*PNAS*
）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、科学技术部、中国科学院等的支持。

论文链接



科研人员实现四原子反应立体动力学调控

研究团队单位：大连化学物理研究所

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转发