

---

# 大连化物所等低温 $F+H_2$ 反应研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5759.html>

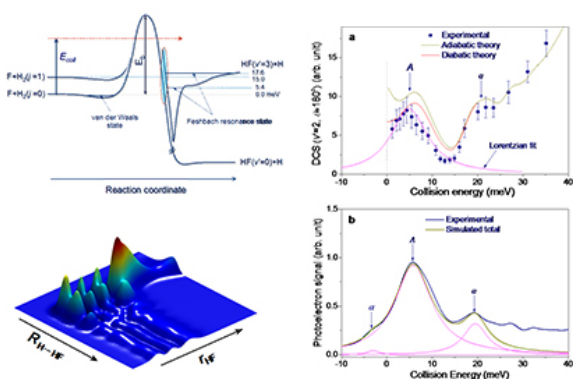
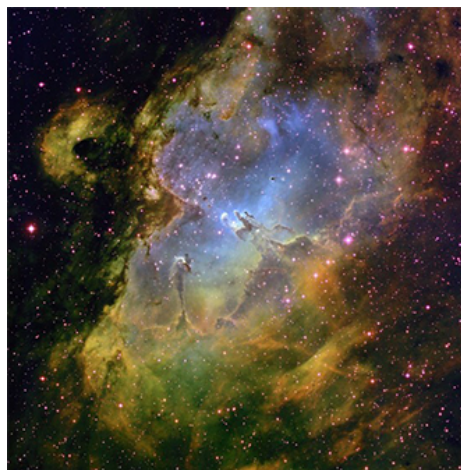
*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

大连化物所等低温 $F+H_2$ 反应研究取得进展。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员肖春雷、孙志刚、中科院院士张东辉和杨学明团队，与美国马里兰大学教授M. Alexander、伯克利大学教授D. Neumark合作，研究了低温下 $F+H_2$ 反应中共振增强隧穿效应，以及探索了其在星际化学中对于产生HF的贡献，相关结果发表在《自然-化学》(Nature Chemistry)上。

1997年，科学家在星际云中首次观测到了HF的存在。近几年，赫歇尔空间天文台发现，HF在星际空间是普遍存在的。而HF在星际空间，只能通过 $F+H_2$ 反应才能产生。但是 $F+H_2$ 反应具有1.8 kcal/mol高度的势垒(78 meV，相当于800 K的高温)，在星际空间的低温下(大约10 K左右)，这个反应有效发生的具体机制暂不明确，因为即使考虑到通常量子力学的隧穿效应，这个反应也是极难进行的。按照通常量子力学隧穿效应去估计，星际空间的HF的含量是不可能被观测到的。

在过去两年，肖春雷和杨学明领导的团队，对现有H原子里德堡态标示时间飞渡谱的交叉分子束装置进行了显著改进，使其能够对低至 $\sim 1$  meV碰撞能的 $F+H_2$ 反应的微分截面进行测量。他们利用改进的交叉分子束装置，详细测量了碰撞能1 $\sim$ 35 meV范围内的后向散射谱。在此后向散射谱上，他们于碰撞能大约5 meV的位置观测到了一个独立的谱峰；而于20 meV的位置，观测到了轻微的振荡。此外，根据孙志刚等人计算的高精度的 $FH_2^+$ 离子的电离能，发现后向散射谱的这两个特征，是和Neumark等人所测得的负离子光电子能谱上过渡态的谱峰精确对应。

为了揭示实验所观测到的后向散射谱特征，孙志刚等人采用自行发展的非绝热量子波包动力学方法，进行了详细的动力学分析。理论分析清晰地表明，位于5 meV能量处的后向散射谱峰，是精确对应于 $F+H_2$ 反应的基态共振态；而位于20 meV能量处的后向散射谱，是精确对应于 $F+H_2$ 反应的激发态共振态。而基态反应共振态对于低温下 $F+H_2$ 反应有显著作用。如果将共振态所导致的共振增强效应移除， $F+H_2(v=0, j=0)$ 在10 K以下的温度下的反应速率常数，会降低三个数量级以上。因此， $F+H_2$ 在低温时的反应性，其实是通过反应共振态所增强的隧穿效应而产生的，而不是通常简单的隧穿效应。通过精确的理论计算，该工作进而给出了 $F+H_2$ 反应在较宽温度范围的速率常数，这对于星际化学过程的精确模拟和研究具有重要意义。



大连化物所等低温F+H<sub>2</sub>反应研究取得进展

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