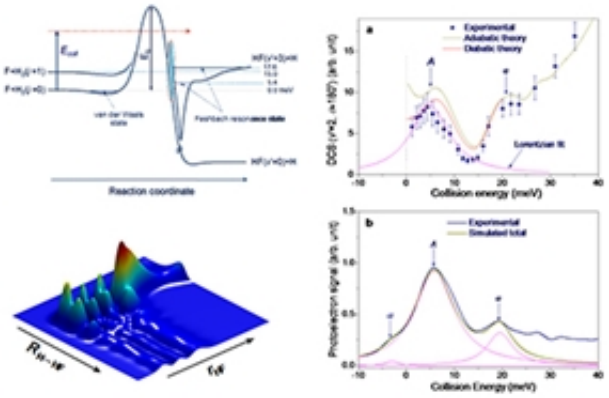
低温F+H2反应研究取得新进展

作者：刘万生 杨天罡 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/5839.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！





低温F+H2反应研究取得新进展。近日，中科院大连化物所肖春雷研究员、孙志刚研究员、张东辉院士和杨学明院士团队，与美国马里兰大学M. Alexander教授、伯克利大学D. Neumark教授合作，研究了低温下F+H2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+H2反应才能产生。

但是F+H2反应具有1.8kcal/mol高度的势垒(78meV，相当于800K的高温)，在星际空间的低温下(大约10K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。 在近两年，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～1meV碰撞能的F+H2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1～35meV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5meV的位置观测到了一个独立的谱峰;而于20meV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FH2-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。理论分析清晰的表明，位于5meV能量处的后向散射谱峰，是精确对应于F

+H2反应的基态共振态;而位于20meV能量出的后向散射谱，是精确对应于F+H2反应的激发态共振态。

而基态反应共振态对于低温下F+H2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+H2(v=0，j=0)在10K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+H2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+H2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的意义。

相关论文信息：doi.org/10.1038/s41557-019-0280-3

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