大连化物所揭示F+H2O→HF+OH反应中的Feshbach共振

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8040.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！

近日，中国科学院院士、中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室研究员张东辉、副研究员刘舒团队揭示了F+H_2O→HF+OH反应中的Feshbach共振现象。

Feshbach共振（动力学共振）是化学反应体系在过渡态区域沿着反应路径形成的具有一定寿命的准束缚量子态，它不仅会对反应速率和产物末态分布产生很大的影响，还提供了一个直接观察化学反应在过渡态附近行为的契机。因而寻找Feshbach共振态一直是反应动力学研究中备受关注的课题。在理论和实验的密切结合下，动力学家们对三原子反应中Feshbach共振的理解已经非常深入和全面。目前反应动力学面临的主要挑战之一，是要把对共振的理解扩展到包含三个以上原子的体系，第一步就是四原子体系。因此，F+H_2O反应是很好的基准体系。和F+H_2反应一样，F+H_2O→HF+OH反应是高放热的，并且在电子基态势能面上有一个较低的早期势垒，在入口通道有一个相对低的van der Waals势阱，在出口通道有一个氢键势阱。早期对FH_2O^-的光解离研究发现存在Feshbach共振态束缚在HF-OH相互作用阱中。然而，还不清楚在光解离实验中观察到的Feshbach共振能否在F+H_2O反应中被观察到，这些共振又会如何影响反应。

近日，该研究团队在新构建的精确神经网络势能面上进行了态-态量子散射计算，得到的总反应几率在碰撞能量0.2 eV以下呈现出很多明显的振荡结构。通过对散射波函数和振动绝热势的分析发现，这些振荡结构来源于HF(v=2)-OH振动绝热势阱捕获的Feshbach共振，主要产生HF(v=1)。然而与F+H_2反应中由于HF键软化在H-HF(v=3)振动绝热势上产生的特殊势阱不同，F+H_2O反应的振动绝热势阱主要来自HF和OH之间的氢键相互作用。这项工作不仅明确地表明，在光解离研究中观察到的Feshbach共振实际上可以通过中性反应得到，而且把对Feshbach共振的理解从三原子反应发展到多原子反应。

相关研究成果发表在《自然-通讯》（*Nature Communications*）上。该工作得到国家自然科学基金委和大连化物所科研创新基金项目的资助。

大连化物所揭示F+H_2O→HF+OH反应中的Feshbach共振

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