大连化物所等揭示双分子碰撞反应中新的漫游机理

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8624.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傅碧娜、中科院院士张东辉团队与大连理工大学教授韩永昌、美国Emory大学教授Joel M. Bowman合作，发现了双分子碰撞反应中碰撞诱导的新的漫游(roaming)机理。

漫游机理是反应动力学中的一种新的反应机理，与常规的经过最小反应能量途径产生的机理不同。尽管漫游机理已经在单分子解离反应中被发现和报道，但是很少有关于双分子碰撞反应的研究。在该研究中，研究人员针对重要的双分子燃烧反应$H+C_2H_4 \rightarrow H_2+C_2H_3$开展了高精度的理论计算研究，揭示了该反应中新奇的碰撞诱导漫游机理。除了络合物介导（complex-mediated）的漫游机理外，该研究还发现了一个非络合物形成的漫游机理。可以将这个过程描述为类似直接的非弹性碰撞，经过碰撞后其中一个H原子很快从不稳定的C_2H_5络合物出去，然后从C_2H_4抽取一个H原子生成H_2，研究人员将这个反应机理命名为“碰撞诱导(collision-induced)”漫游。通过络合物介导和碰撞诱导这两种漫游机理发生的产物，会呈现出明显不同的产物散射角分布，但是两者都会产生内振转高度激发的C_2H_3。并且，与经过最小反应能量途径的直接抽取机理相比，漫游机理会产生明显不同的动力学信息。该工作不仅澄清了氢原子与乙烯反应的动力学机理，而且预测了其他类似反应也很有可能跟这个新的漫游反应机理有关，为实验探测漫游机理提供了较好的理论支持。

相关工作发表在《化学科学》（*Chemical Science*）上。该工作得到国家自然科学基金、国家科技部重点研发计划和中科院先导专项B“能源化学转化的本质与调控”的支持。

络合物介导与碰撞诱导漫游机理的H_2产物在平动能和角度上的三维分布对比图

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