



请输入关键字

首页 (../..)/> 头条新闻 (../)

近代物理所发现范德瓦尔斯团簇中的重离子隧穿转移形成分子新机制

文章来源: | 发布时间: 2020-06-12 | 【打印】 【关闭】

中国科学院近代物理研究所马新文研究团队联合北京应用物理与计算数学研究所及法国科研中心的团队，在高电荷态重离子诱发范德瓦尔斯团簇碎裂实验中，首次发现了重离子隧穿转移形成分子的新机制。该机制丰富了对弱束缚体系反应机制的认识，并有助于深入理解生物系统微观环境中的化学现象。相关成果于6月12日发表在《自然通讯》上。

原子间库仑衰变证明了由于相邻原子的存在，原本单个原子/分子中不可能发生的反应通道会被打开。已有研究表明，氢键团簇中的质子转移涉及团簇内大距离上的质量和电荷迁移，并导致团簇的碎裂。这些过程都是典型的环境效应，并与生物化学、遗传变异和放射治疗有重要关联。

DNA双螺旋结构发现后，关于氢键团簇中的质子转移造成DNA突变的假说，历经50多年，最近才被实验证实并被学界接受。在生物环境中除了氢原子外，还存在大量的碳、氮、氧原子，那么，在生化过程中是否存在重离子转移并导致碎裂？

中科院近代物理所研究员朱小龙介绍：“范德瓦尔斯团簇是回答上述科学问题的理想实验模型。”范德瓦尔斯团簇是自然界中普遍存在的弱束缚的原子/分子系统，是了解生物系统中微观环境化学现象的重要媒介。

科研人员以中性 N_2Ar 团簇为模型，利用加速器提供的1 MeV能量的 Ne^{8+} 离子与其碰撞，产生双电荷团簇 $(N_2Ar)^{2+}$ 离子，并观测到了奇异的重离子 N^+ 转移通道： $(N_2Ar)^{2+} \rightarrow N^+ + NAr^+$ 。在此反应通道中， N_2Ar 团簇失去两个电子后， N_2 分子的强N-N共价键断裂，质量为14的氮离子从团簇的分子中心通过量子隧穿机制转移到Ar原子中心，并形成新的N-Ar键。这种重离子转移反应机制是首次被发现。

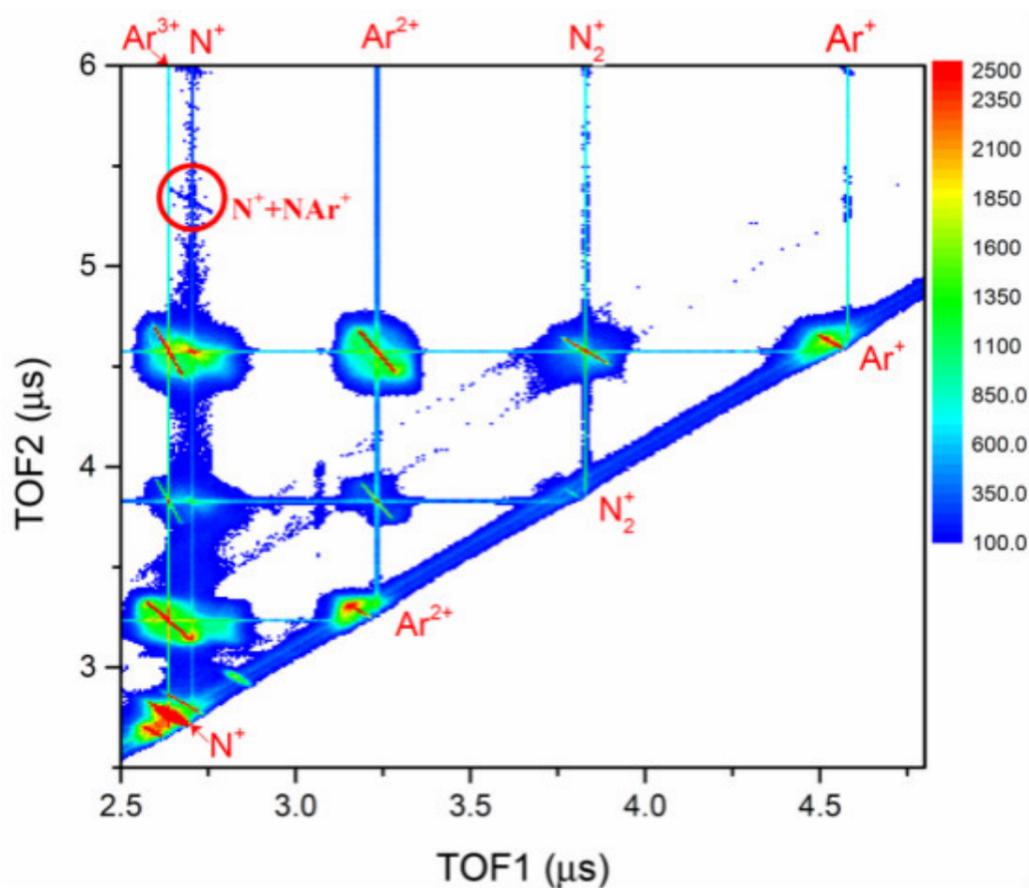


图1: 碎片离子的飞行时间关联谱: $N^+ + NAr^+$ 反应通道存在的直接证据

研究揭示了该通道反应的细节：首先团簇中的“ N_2 ”分子丢失两个电子生成母体团簇离子 $N_2^{2+}Ar$ ，而旁观中性Ar原子与 N_2^{2+} 之间的极化作用促使 $N_2^{2+}Ar$ 团簇离子发生异构化，并减小了 N_2^{2+} 分子离子势垒的高度和宽度，导致亚稳态分子离子的隧穿解离寿命显著缩短。这引发了分子离子中的 N^+-N^+ 共价键的断裂、 N^+ 离子从 N_2^{2+} 分子离子势阱



中的隧穿以及 $N-Ar^+$ 的形成几乎同时发生。接着， N^+ 和 NAr^+ 离子对发生库仑爆炸。

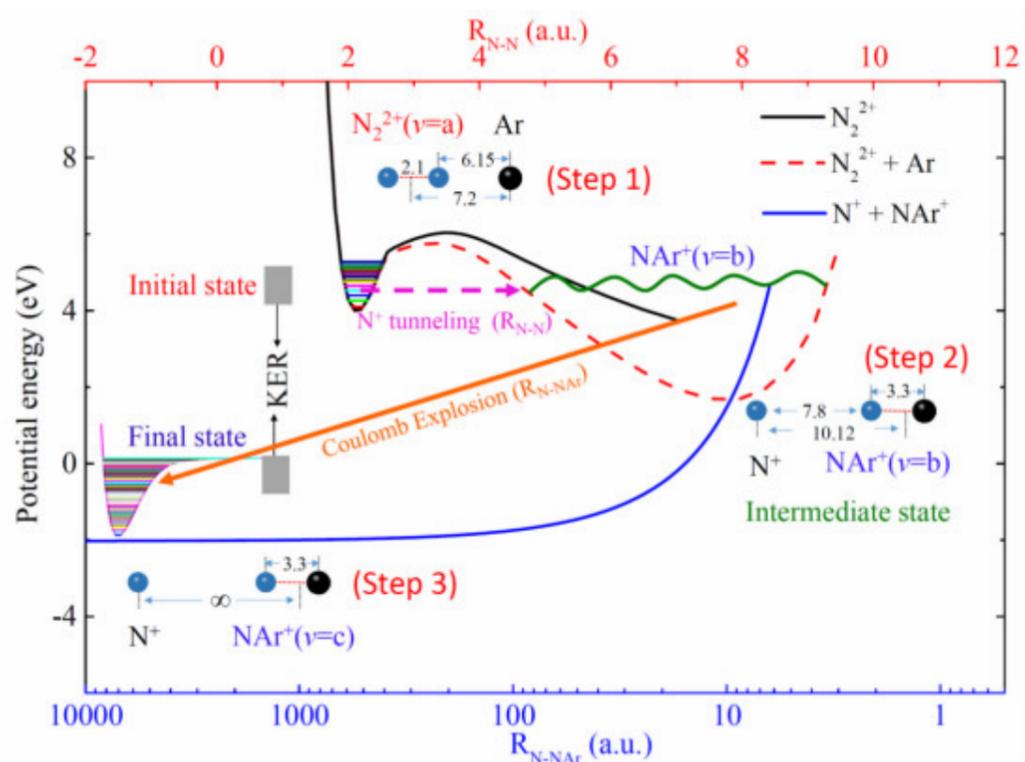


图2： 重的氮离子转移过程示意图

中科院近代物理所研究员马新文表示：“研究中首次发现的重离子转移导致团簇分子离子碎裂机制，实际上很可能在生物环境中具有普适性，并且对理解生物系统的生化动力学具有潜在的重要性。”

在该项工作中，第一作者中科院近代物理研究所朱小龙研究员主导了加速器上的实验研究，共同第一作者、北京应用物理与计算数学研究所的胡晓青做了详细的理论计算，中科院近代物理研究所马新文研究员与北京应用物理与计算数学研究所吴勇研究员为论文的共同通讯作者。

该研究得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、科工局科学挑战计划等项目的支持。

文章链接：<https://www.nature.com/articles/s41467-020-16749-w>
(<https://www.nature.com/articles/s41467-020-16749-w>)

(原子分子结构与动力学研究室 供稿)



(<http://www.cas.cn/>)

版权所有 © 中国科学院近代物理研究所 中国·兰州
地址：甘肃省兰州市南昌路509号 邮编：730000
电话：0931 - 4969220 E-mail: office@impcas.ac.cn
ICP备案号：陇ICP备05000649号 (<https://beian.miit.gov.cn>)



(<http://bszs.cc>)

甘公网安备 62010202000713号
(<http://www.beian.gov.cn/portal/registerSystemInfo?recordcode=62010202000713>)

