DICP 南方科技大学 SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY 之江实验室 ZHEJIANG LAB 中国科学院紫金山天文台 PURPLE MOUNTAIN OBSERVATORY, CAS

NCAC

第一届全国天体化学研讨会

The 1st National Conference on Astrochemistry



2025 会议摘要集

Conference Abstracts

大会报告

星际分子光化学动力学研究

杨学明 [1,2]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，化学反应动力学全国重点实验室，大连，116023
[2] 南方科技大学，化学系/先进光源科学中心，深圳，518055
*Email: xmyang@dicp.ac.cn

先进光源在前沿科学研究中发挥着越来越重要的作用。近年来，自由电子激光技术的突破为科学家提供了探索未知世界、发现新科学规律、实现技术变革的重要工具。大连相干光源是我国首套基于 HGHG 模式的、超高亮度且具有超快时间特性的可调极紫外自由电子激光综合实验装置，也是国际上唯一工作在极紫外的自由电子激光用户装置。大连光源与电离探测、质谱和光谱等先进的实验方法紧密结合，逐步发展成为世界独特的基础物理化学实验研究平台，为星际化学、能源化学、大气化学、生物化学领域基础前沿科学研究提供了重要支撑。分子光化学是研究分子吸收光子发生碎片化或异构化的过程，是研究化学反应机理的基础。分子光化学过程产生的高活性原子、分子或者自由基是星云和行星大气发生链式反应的“发动机”，对星云和行星的演化有重要作用。过去 40 年来，分子光化学动力学研究取得了很大进展，几乎所有小分子在紫外波段(200~400 nm)的光化学行为都有大量文献报道。但是由于缺乏高亮度、可调谐的极紫外光源以及实验探测的困难，分子光化学在极紫外波段(50~150 nm)鲜有研究。尤其是宇宙早期存在的重要小分子，如 H_2O、CO_2、CH_4、 CO、H_2 等，其电子吸收谱都位于极紫外波段，这些分子在极紫外光驱动下的光化学反应是理解宇宙早期分子演化和生命起源的关键，然而它们的光化学信息非常缺乏。因此，星际小分子极紫外光化学是目前分子光化学领域科学家角逐的重点方向。过去几年来，基于大连光源输出的高亮度、可调谐、无背景光干扰的极紫外激光，结合高灵敏和高分辨的探测技术，系统地研究了若干小分子的光化学反应。本次报告主要介绍这些小分子的光化学反应机理，以及其在解释天文观测数据和理解星际介质来源中所起的作用。

我国亚毫米波/太赫兹天文发展现状与规划

史生才[1]

[1]中国科学院紫金山天文台，南京，210033
*Email: scshi@pmo.ac.cn

亚毫米波/太赫兹介于传统射电与光学红外之间，信号产生与探测等技术极具挑战。此外，地球大气中的水分子对亚毫米波/太赫兹信号具有强吸收效应，导致该电磁谱段的相关科学研究与应用更为困难。得益于高灵敏度超导探测技术的发展，亚毫米波/太赫兹天文得到快速发展，包括迄今地面最大望远镜（阵列）ALMA 的建成和人类首张黑洞照片拍摄等若干重大科学突破。与欧美日等相比，我国目前的射电天文望远镜还主要集中在低频射电及毫米波段。但我国在亚毫米波天文技术储备、台址勘察及人才队伍建设等方面的工作一直有序推进，也积极参与 ALMA 等国际大科学装置的合作。本报告将主要介绍我国亚毫米波/太赫兹天文发展规划、超导探测器等关键核心技术进展、以及相关观测设施的建设情况。

构建宇宙氢分子：从物理到化学

李茜 [1]

清华大学 [1]，北京市海淀区，100084
*Email: dili@tsinghua.edu.cn

氢是宇宙最丰富的重子成分。氢分子（H_2）的形成标志着宇宙物质演化由“物理主导”转向“化学驱动”。H_2 是分子云冷却、星际化学网络与恒星形成的起点。然而在气相中，两个氢原子几乎无法直接结合成稳定的 H_2：依据 Noether 定理，时空对称性要求能量与动量严格守恒，两体系统无法在无第三体的情况下有效带走结合能，使得气相反应截面低到不足以建立宇宙的分子含量。

第一代恒星之后，金属与尘埃产生，H_2 的主要通道转向尘埃表面。尘埃通过吸附、迁移与结合过程承担结合能与动量的再分配，从而绕开气相反应的守恒约束，引导宇宙进入分子冷却与化学复杂化的阶段。然而经典模型预言低温（10 – 20 K）下尘埃表面反应需跨越 0.1 – 0.5 eV 的势垒，效率应极低，与观测明显矛盾。

FAST 等新一代射电望远镜揭示的 HI 窄自吸收（HINSA） 提供关键突破。HINSA 利用冷 HI 对背景 HI 发射的选择性吸收，直接描绘原子—分子过渡区的温度、密度与光深结构，精确约束 H_2 的形成速率。相比依赖化学模型推断的传统方法，HINSA 在灵敏度、温度指示性与几何解释性方面具突破优势，是研究分子云“起源面”的革命性观测手段。最新多尺度理论研究进一步指出：尘埃表面的反应效率在宽广温度范围内仍可保持高水平，部分归因于氢原子的量子行为（包括少量隧穿与零点能效应），从而避免经典势垒在低温下的完全抑制。这一机制与 HINSA 观测结果一致。

H_2 的构建决定分子云冷却时间、星形成阈值以及星系化学演化。理论发展与 FAST-HINSA 的观测突破，使我们得以从新的角度理解宇宙如何从简单原子气体走向复杂分子世界。

关键词：分子宇宙；恒星形成；FAST

大山深处仰望星空：JUNA 锦屏深地核天体物理进展

柳卫平 [1]

[1] 南方科技大学，深圳，518055
*Email: liuwp@sustech.edu.cn

宇宙创生 3 分钟后发生了什么？比铁更重的元算是怎么产生的？宇宙中的碳氧比是如何形成的？报告将介绍这些研究的国际最新进展。在基金委重大项目等支持下，JUNA 团队基于中国锦屏深地实验室 CJPL，自主研制了国际最强流深地核物理实验装置，自主发展了极低本底高效率核天体物理反应测量方法，攻克了近伽莫夫能量极低截面核天体反应直接测量的重大难题。通过研究排除了天文观测氟丰度超出的核物理因素；取得了最精确的伽马射线天文反应数据；澄清了天体重元素合成的中子源反应率分歧；圣杯反应达到了最高灵敏度；发现了辐射俘获的新共振，解释了最古老恒星的钙丰度超出，首次使得利用 SiC 陨石颗粒确定前身 AGB 星质量成为可能。成果发表 Nature 1 篇， PRL 文章 3 篇，Sci. Bull 1 篇，在 NIC、APPC15 和 NUSPEQ 作大会邀请报告，成果入选 2021 年两院院士大会战略高科技进展、获得中国核学会杰出贡献奖和中核集团科技进步特等奖。

主旨报告

量子态分辨的分子散射实验研究

王兴安

[1] 中国科学技术大学，金寨路 96 号，230026

Email: xawang@ustc.edu.cn

交叉分子束技术长期以来一直是化学反应动力学研究中的关键实验手段。近年来，随着高分辨离子速度成像和激光近阈值电离等实验技术的引入，研究人员能够在精确控制的实验条件下，实现对量子态分辨的微分反应截面的高精度测量。本文主要介绍我们近年来利用高分辨交叉分子束技术，在若干典型基元反应中获得的离子速度成像实验结果，涵盖 H + HD/D_2 等重要反应体系[1 – 3]，并重点阐述 F+HD 和 N + D_2 体系的最新研究进展。通过获取反应产物的量子态分辨微分截面及其空间分布特征，并结合高精度理论计算进行对比分析，我们揭示了这些反应体系的微观机理，从而深化了对分子反应动力学机理的理解。

关键词：交叉分子束；离子速度成像；量子态分辨微分截面

参考文献：

[1] Yuan, D. F.; Guan, Y. F.; Chen, W. T.; Zhao, H. L.; Yu, S. R.; Luo, C.; Tan, Y. X.; Xie, T.; Wang, X. A.; Sun, Z. G.; Zhang, D. H.; Yang, X. M. Science 2018, 362: 1289.

[2]. Li, S. H.; Huang, J. Y.; Lu, Z. B.; Shu, Y. Y.; Chen, W. T.; Yuan, D. F.; Wang, T.; Fu, B. N.; Zhang, Z. J.; Wang, X. A.; Zhang, D. H.; Yang, X. M. Nat. Commun. 2024, 15: 1698

[3] Tan, Y. X.; Zhao, B.; Yuan, D. F.; Li, F.; Yu, S. S.; Jin, M. D.; Zhang, Y.; Luo, C.; Chen, W. T.; Wang, T.; Zhu, J. K.; Wang, Z. W.; Yang, T. G. ; Liu, S.; Manthe, U.; Wang, X. A.; Zhang, D. H.; Yang, X. M.; Nat. Commun. 2025, 16: 5893.

带电粒子与分子反应动力学

田善喜 [1,2*]

[1] 中国科学技术大学化学物理系，合肥，230026
[2] 化学动力学全国重点实验室，大连，116023
*Email: sxtian@ustc.edu.cn

行星大气和稠密星云中常发生带电粒子（电子、原子离子、分子离子等）与分子的碰撞反应，碰撞能涵盖低温的几开尔文至几千电子伏特的广阔区域。其中，化学反应主要发生在几十电子伏特以下能量区间的碰撞中。我们研究组在近十年利用低能量（20eV 以下）脉冲（几十至百纳秒）电子束、离子束和正（负）离子速度成像（质谱）技术，针对火星、金星、地球大气和星云等相关科学问题开展了系列实验研究，提出和观测到大气氧气起源、分子负离子超激发态、暗态分子负离子、电荷转移解离立体动力学与共振散射等新机制和新现象，为深入了解大气与星际中物质演化提供了重要参考，拓展了相关研究范畴。

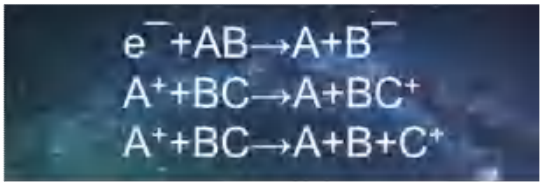


图 1：大气与星云中发生的低能量电子贴附解离与离子分子反应

关键词：行星大气；星云；电子–分子碰撞；离子–分子反应

参考文献：

[1] Wu, et al. *Phys. Rev. A* 2012, 85: 052709; Li, et al. *Phys. Rev. A* 2019, 99: 032703; Fan, et al. *J. Phys. Chem. A* 2022, 126: 3543; Fan, et al. *J. Chem. Phys.* 2024, 160: 044301; Fan, et al. *Phys. Scri.* 2025, 100: 025404.

[2] Tian, et al. *Phys. Rev. A* 2013, 88: 012708; Wang, et al. *J. Chem. Phys.* 2015, 143: 066101.

[3] Wang, et al. *Nat. Chem.* 2016, 8: 258; Zhi, et al. *Comm. Chem.* 2023, 6: 267.

[4] Li, et al. *J. Phys. Chem. A* 2019, 123: 9089; Meng, et al. *J. Chem. Phys.* 2020, 153: 024301; Xie et al. *J. Phys. Chem. Lett.* 2023, 14: 598; Xie, et al. *J. Chem. Phys.* 2023, 158: 181101.

[5] Gao et al. *J. Phys. Chem. Lett.* 2020, 11: 9110; Gao, et al. *Comm. Chem.* 2021, 4: 13.

[6] Hu et al. *J. Phys. Chem. Lett.* 2021, 12: 1346; Hu et al. *J. Phys. Chem. Lett.* 2021, 12: 7127; Guo, et al. *J. Phys. Chem. A* 2024, 128: 3821.

[7] Guo, et al. *J. Chem. Phys.* 2025, 162: 134303; Guo, et al. *J. Phys. Chem. A* in press; Zheng, et al. *Chin. J. Chem. Phys.* in press; Zheng, et al. (to be submitted); Guo, et al. (to be submitted).

含磷星际小分子的化学演化

姜俊杰，曾小庆*

[1] 复旦大学，上海市杨浦区，200438
*Email: xqzeng@fudan.edu.cn

磷是生命必须元素之一，星际含磷小分子被视为生命前物种，其在星际介质中的分布与化学演化一直以来备受星际化学的高度关注。其中，双原子分子 PN 和 PO 是目前星际观测的主要含磷载体。多个星际磷化学模型预测两者在星际介质中的化学演化可能涉及大量新奇含磷物种[1]，而受限于 PN、PO 的极不稳定性以及缺乏有效的实验室制备方法，使得目前对两者的基元反应以及相关衍生物种的研究依赖理论计算模拟，而实验研究则极为缺乏。为此，我们通过前驱分子的设计合成，结合高真空闪光解热和低温基质隔离光谱探测技术，实现多个潜在星际含磷小分子的高效制备与表征，获取其标准光谱数据，揭示物种之间的化学转化机制，为天文谱学探测和构建星际磷化学模型提供重要实验依据[2]。

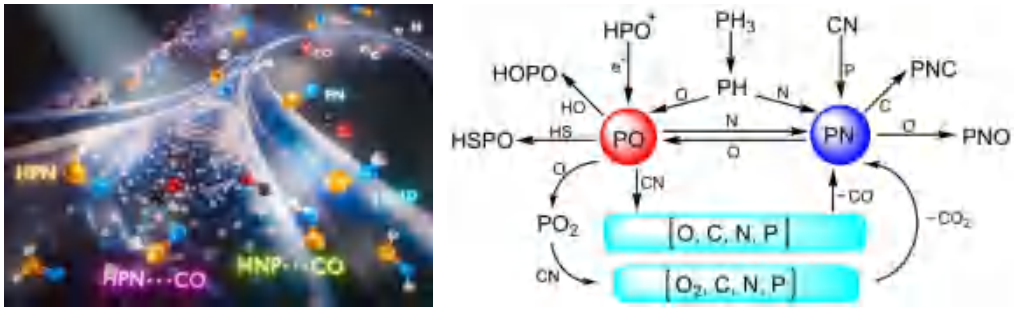


图1：典型含磷星际分子PN的化学演化

关键词：星际化学；含磷星际分子；红外光谱；化学演化

参考文献：

[1] a) L. A. Koelemay, K. R. Gold, L. M. Ziurys, *Nature* **2023**, *623*, 292−295; b) R. Ravi, A. P. Singh, A. M. S. Richards, R. M. Humphreys, L. Decin, L. M. Ziurys, *Astrophys. J. Lett.* **2024**, *971*, L43; c) M. Fernández-Ruz, I. Jiménez-Serra, J. Aguirre, *Astrophys. J.* **2023**, *956*, 47.

[2] a J. Jiang, Y. Guo, L. Huang, L. Wang, G. Rauhut, X. Zeng, *unpublished results*; b) J. Jiang, L. Huang, B. Zhu, W. Fan, L. Wang, I. Y. Zhang, W. Fang, T. Trabelsi, J. S. Francisco, X. Zeng, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, *64*, e202414456; c) B. Lu, J. Jiang, L. Wang, A. R. Jupp, J. M. Goicoechea, S. Liu, Z. Li, M. Zhou, X. Zeng, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 18699−18705; d) B. Zhu, M. Wang, J. Jiang, N. Jiang, J. Hong, G. Rauhut, G. Wang, W. Li, X. Zemg, *Astrophys. J.* **2024**, *964*, 182; e) B. Lu, L. Wang, X. Jiang, G. Rauhut, X. Zeng, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202217353; f) B. Lu, X. Shao, X. Jiang, L. Wang, J. Xue, G. Rauhut, G. Tan, W. Fang, X. Zeng, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 21853−21857.

金属碳化物的光电子能谱:为天文观测提供基本信息

郑卫军

中国科学院化学研究所，北京，100190
*Email: zhengwj@iccas.ac.cn

当前关于金属碳化物的实验数据非常匮乏，导致天文学家所探测到的星际金属碳化物分子不多。我们通过实验产生了相关的金属碳化物，测定了其负离子光电子能谱，并对其结构和性质进行了研究。期待相关研究结果能够为天文观测提供基本数据，为后续进一步高分辨光谱实验打下良好的基础，从而有助于天文学家在星际环境中发现新的金属碳化物分子，并对金属碳化物在星际环境中的形成和演化过程进行模拟和预测。

基于基本不变量-神经网络势能面的量子态分辨动力学机制

傅碧娜 [1,*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，大连，116023
*Email: bina@dicp.ac.cn

量子态分辨的复杂分子动力学理论研究对理解星际化学、天体化学、燃烧化学等具有重要意义，但是由于维度灾难和理论方法的制约，长期以来精确的动力学研究局限于原子数较少（小于 6 原子）的体系。我们发展了精确有效的基本不变量-神经网络（FI-NN）势能面构建新方法，实现了 10 个原子以上体系的量子态分辨动力学研究；发展了激发态势能面和动力学研究方法，发现了首例分子高激发态解离中的漫游机制，为理解和预测光化学反应提供新视角；揭示了复杂多原子碰撞反应中的新奇漫游机制和立体位阻效应等，解决长期存在的精确动力学理论研究局限于小分子水平的难题。

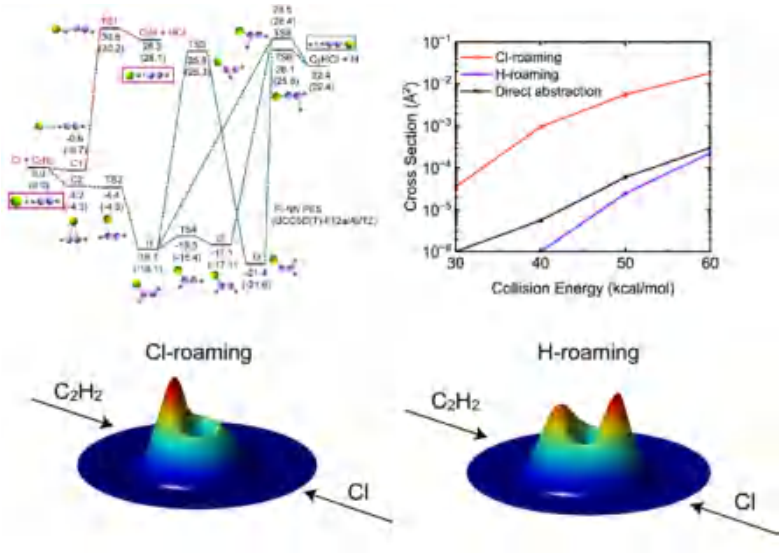


图1：Cl+C_2H_2反应的漫游机制示意图

关键词：漫游机制，基本不变量–神经网络；量子态分辨，全维势能面，激发态

参考文献：

[1] Y. Bai, Y. Fu, Y. Han, B. Fu*, et al. *Nat. Commun.*, 2025: 16, 2732.

[2] L. Liu, Y. Fu, B. Fu*, et al. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2025: 16, 460.

[3] X. Lu, Y. Han*, B. Fu*, et al. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2025: 16, 8771.

[4] Y. Hao, B. Fu*, et al. *J. Chem. Theory Comput.*, 2025: 21, 1046.

[5] Z. Li, Y. Fu, B. Fu*, K. Yuan*, D. H. Zhang, X. Yang, et al. *Science*, 2024, 383: 746.

[6] Y. Liu, L. Liu, B. Fu*, W. Dong*, D. H. Zhang*, X. Yang*, et al. *Nat. Chem.*, 2025, 17: 897.

Tracing the Chemical Roots of Life: Discovery and Formation of Complex Amides in Hot Molecular Cores

Qian Gou*

School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing Key Laboratory of Chemical Theory and Mechanism, Chongqing University, Daxuecheng South Rd. 55

*Email: qian.gou@cqu.edu.cn

The emergence of life on Earth ~3.8 billion years ago highlights the need to understand the origin of complex organic molecules under astrophysical conditions. Here, we report the first detection of syn-glycolamide ($HOCH_2C(O)NH_2$), a prebiotic isomer of glycine, in the hot molecular core G358.93−0.03 using ALMA Band 7 observations [1]. Structurally related to acetamide, syn-glycolamide suggests a potential chemical linkage within interstellar amide chemistry. A spectral survey of 52 hot cores with ALMA Band 6 revealed consistent abundance correlations among acetamide and related species such as formamide, CH_3NHCHO, and CH_3NCO, indicating chemically connected formation pathways [2]. To further probe the synthesis of acetamide, we analyzed its proposed precursor, acetaldehyde (CH_3CHO), in 50 high-mass star-forming regions using IRAM 30-m telescope data, supported by time-dependent gas-grain chemical modeling [3]. The results favor a grain-surface dominated route, where CH_3CHO forms via CH_3OH + HCO reactions, followed by gas-phase processing during the warm-up phase. These findings demonstrate that complex amides can form and persist in star-forming environments, reinforcing their significance in prebiotic chemical evolution.

Keywords：ISM; Amides; Abundances; Astrochemistry; Rotational transition

References：

[1] Duan, C.; Xu, F.; Xu, X.; Gou, Q.; Pagani, L.; Chen, X. *manuscript in preparation*.

[2] Duan, C.; Xu, X.; Gou, Q.; Liu, T.; Pagani, L.; Xu, F.; Wang, K.; Liu, X.; He, M.; Jiao, J. Astron. Astrophys. 2025, DOI: https://doi.org/10.1051/0004-6361/202556073.

[3] Xu, X.; Wang, J.; Gou, Q.; Li, J.; Quan, D.; Li, D.; Li, F.; Duan, C.; Lei, J. Publ. Astron. Soc. Jpn. 2025, 77, 307-327.

气相和气液界面分子反应动力学

李军 [1,*]

[1] 重庆大学化学化工学院&化学理论与机制重庆市重点实验室，重庆，401331
*Email: jli15@cqu.edu.cn

星际空间有着复杂的化学反应，它们决定了分子的种类和丰度，而这正是分子反应动力学的研究范畴。天体化学不断发展，对分子反应动力学的需求愈发显著。在研究行星大气的化学组成和气候演变过程中，精确了解各种分子间的反应速率和机制，对于揭示行星大气的奥秘，更好地理解诸如地球大气中温室气体的产生与消耗过程，以及其他行星大气中独特的化学现象等至关重要。

分子反应动力学研究化学反应过程中原子、分子动态变化的根本性质和规律。理论上，复杂的电子结构导致精确计算其能量非常困难，原子数增加导致原子核维度增加，这些使得精准高效构建复杂高维势能面以及复杂核运动方程求解极具挑战。结合人工智能和多种动力学方法，我们课题组针对复杂分子体系开展了比较系统的动力学理论研究。对于气相体系，发展和应用对易不变多项式-神经网络（PIP-NN）及Δ-machine learning approach (Δ-ML)方法构建其全维高精度势能面，应用于从三原子到八原子体系的三十多个全维高精度势能面，并采用多种动力学方法开展了量子态分辨的分子反应动力学研究，发现了新的反应动力学现象和规律，揭示了新的微观反应机制，解决了实验争议，与实验合作高精度表征化学反应过渡态区域动力学性质，确认量子共振态，极大丰富和拓展了人们对分子反应动力学的认识和理解。报告还将介绍我们关于气液界面散射动力学的最新研究进展。

关键词：星际化学；碰撞传能；分子动力学；人工智能；差值势能面

参考文献：

[1] Y. Liu, H. Song, D. Xie, J. Li, H. Guo, J. Am. Chem. Soc., 2020, 142, 3331

[2] Y. Liu, J. Li, J. Phys. Chem. Lett. 2022, 13, 4729

[3] D. Yuan#, Y. Liu#, T. Trabelsi#, Y. Zhang, J. Li, J. Francisco, H. Guo, L. Wang, PNAS, 2024, 121, e2314819121

[4] J. Li, H. Guo, J. Li, J. Phys. Chem. Lett., 2024, 15, 5824

[5] J. Xue, X. Shao, J. Li, J. Li, T. Trabelsi, J. Francisco, X. Zeng, J. Am. Chem. Soc., 2024, 146, 5455

[6] J.H. Li, H. Guo, J. Li, J. Phys. Chem. Lett., 2024, 15, 5824.

[7] Y. Peng#, J.L. Li#, Z. Song, M. Li, Y. Xiao, X. Wang, T. Wang, Y. Xie, J. Li, T.G. Yang, JACS Au, 2025, 5, 4260

星际化学新范式：超越传统结构的星际分子形成与探测

杨涛

华东师范大学，精密光谱科学与技术高等研究院，上海 200062，中国
*Email: tyang@lps.ecnu.edu.cn

本报告聚焦超越传统分子结构的星际复杂有机分子的形成与探测，例如三氧化二氢(HOOOH)、原甲酸($CH(OH)_3$)以及甲烷四醇($C(OH)_4$)等，并揭示能够解释天文观测异常分子丰度的新型化学反应网络，为冷分子云、太阳系生命前分子的地外起源提供新颖证据。基于简单的冰化学物质成分组成（如水-氧气、甲醇-氧气、水-二氧化碳等）与模拟银河宇宙射线的电子辐照作用下的冰相反应，我们结合程序升温脱附、真空紫外光电离反射式飞行时间质谱、四极杆质谱等多种技术，并联合选择性同位素标记实验与高精度量化计算，对这些奇异分子的新颖结构、形成机制与独特探测方法进行探讨。研究结果为理解冷分子云、柯伊伯带天体及木卫二、土卫六等冰卫星中的分子演化提供了独特视角，并推动星际化学从传统稳定结构研究向非常规分子系统的范式转变。

关键词：星际化学；冰类似物；复杂有机分子；真空紫外光电离反射式飞行时间质谱(VUV-PI-ReTOF-MS)

参考文献：

[1] Bai, X.†; Li, C.†; Luo, Y.†; Gong, Q.; Lu, J.; Yang, J.; Pan, Y.; Sun, Z.; Eckhardt, A. K.*; Sun, R.*; Kaiser, R. I.*; Yang, T.* *Sci. Adv.* 2025, 11, eadw5720.

[2] Marks, J. H.; Bai, X.; Nikolayev, A. A.; Gong, Q.; McAnally, M.; Wang, J.; Pan, Y.; Fortenberry, R. C.*; Mebel, A. M.*; Yang, T.*; Kaiser, R. I.* *Nat. Commun*. 2025, 16, 6469.

[3] Marks, J. H.; Bai, X.; Nikolayev, A. A.; Gong, Q.; Zhu, C.; Kleimeier, N. F.; Turner, A. M.; Singh, S. K.; Wang, J.; Yang, J.; Pan, Y.; Yang, T.*; Mebel, A. M.*; Kaiser, R. I.* *J. Am. Chem. Soc*. 2024, 146, 17, 12174–12184.

分子天体化学的射电观测研究

王均智

广西大学物理科学与工程技术学院，广西区南宁市大学东路 100 号，530004

*Email: junzhiwang@gxu.edu.cn

摘要正文：我将介绍针对恒星形成过程中几类分子开展的观测研究，包括：氘化分子、含硫分子、NO 分子、碳链分子以及激波过程，探讨它们的天体化学过程(形成与破坏)以及在恒星形成研究中的应用。

Widespread Hot Molecular Gas Heated by Shear-induced Turbulence in the Galactic Center

Author (J. Li)[1,2], Second Author(J.Z. Wang)[3], Corresponding Author(J. Li)[1,*]

[1]Shanghai Astronomical Observatory, Chinese Academy of Sciences, No. 80 Nandan Road, Shanghai, 200030, P. R. China
[2]State Key Laboratory of Radio Astronomy and Technology, A20 Datun Road, Chaoyang District, Beijing, 100101, P. R. China
[3]Guangxi Key Laboratory for Relativistic Astrophysics, Department of Physics, Guangxi University, Nanning 530004, P. R. China
*Email: lijuan@shao.ac.cn

We observed NH3 metastable inversion lines from (3, 3) to (18, 18) toward G0.66-0.13 in the Galactic center with the Shanghai Tianma 65m radio telescope and Yebes 40 m telescope. Highly-excited lines of NH3 (17, 17), (18, 18) were detected in emission for the first time in the interstellar medium, with upper energy levels up to 3100 K. Mapping observations reveal widespread hot molecular gas traced by NH3 (13, 13) toward G0.66-0.13. The rotation temperatures of hot gas traced by NH3 exceed 400 K, which amounts to five percent of the total NH3 in the Galactic Center. Hot gas (>400 K) and warm gas (100-140 K) are found in distinct clumps, with the hot gas located at the interfacing regions between different warm clouds. The theory of intermittency in turbulence reproduces the complex temperature structure in the central molecular zone, especially the hot gas observed here. The results presented here demonstrate that turbulence heating dominates the heating of the molecular gas in the Central Molecular Zone, while the turbulence is induced by the shear-motion of molecular clouds under the gravitational potential of the nuclear star clusters and the supermassive black hole. Our results suggest that shear-induced turbulence heating could be a widespread factor influencing galactic evolution.

Keywords：Galaxy: center --- ISM: clouds --- ISM: molecules --- radio lines: ISM

References：

[1] Li, J.; Wang, J.; Shen, Z. et al., *ApJ, under review*

利用 FAST 搜寻多环芳烃旋转谱

张泳*

中山大学，物理与天文学院，中国广东省珠海市香洲区唐家湾大学路 2 号，519082

*Email: zhangyong5@mail.sysu.edu.cn

未证认红外发射（UIE）带广泛存在于天文环境中，其载体通常被认为是含 100 个以上碳原子的多环芳烃（PAHs），但这一结论仍存较大争议，本报告将对该课题相关研究进行梳理。 射电波段下 PAHs 转动跃迁的搜寻，是揭示 UIE 带载体起源的关键。基于此，本研究利用全球分米波波段灵敏度最高的 500 米口径球面射电望远镜（FAST），对具有准对称性的大型 PAHs 转动跃迁展开探测。研究样本涵盖两个典型 UIE 源（NGC 7027、TMC-1），并纳入一个非 UIE 源（IRC+10216）作为对照。 在 FAST 光谱分析中，研究采用匹配滤波技术，旨在分离含 138 至 194 个碳原子的准对称 PAHs 所产生的梳状光谱特征，该技术显著提升了对这类天体物理关键分子信号的探测灵敏度。结果显示，本次探测未发现上述特征，但基于简化假设推导得出了大型 PAHs 丰度的上限值。该上限值低于理论模型预测值（图 1），这或可初步提示大型 PAHs 并非 UIE 带的主要载体；不过，由于结论依赖尚未经实验验证的简化假设，因此需将其视为初步推断。

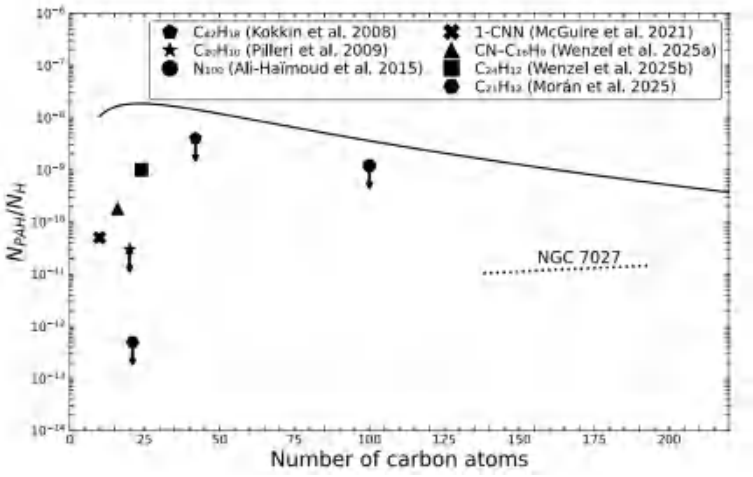


图1：PAHs丰度上限与理论值(实线) 比较

关键词：星周物质；多环芳香烃；红外光谱

参考文献：

[1] Shao, Y; Zhang, Y, Ouyang, X.-J., Zhang, C.-P., MNRAS, 2025, 542, 2639

Measuring CNO isotopic abundances with molecular lines

Zhi-Yu Zhang 张智昱[1,*]，孙逸辰[1]，…，王均智[2,*]，…

[1] 南京大学天文与空间科学学院，南京，210023
[2] 广西大学物理科学与技术学院，南宁，邮编
*Email: xxx@xxx

Variations of elemental abundance and their ratios along the Galactocentric radius provide key information about the chemical evolution of the Milky Way. The 12C/13C ratio, in particular, is widely adopted as a proxy to infer other isotopic ratios, such as 16O/18O and 14N/15N. Traditionally, emission lines of 12CN and 13CN – with their optical depths corrected based on their hyper-fine structure lines – have traditionally been exploited to measure 12C/13C isotopic ratios. However, such a method has major pitfalls, with oversimplified (and overlooked) assumptions in both theory and observational interpretations (Fig. 1). The optically-thin satellite-lines of 12CN and 13CN transitions present the advantages over the 'classical method', but still suffers bias from non-trivial effects from non-Local Thermal Equilibrium conditions. We will also show new ALMA observational results of 13C18O, C18O and C17O, as possibly more reliable tracers for CNO isotopic ratios.。

参考文献：

[1] Y.C. Sun, Z.-Y. Zhang, J. Wang, et al.. *MNRAS.* 2024, 527: 8151S.

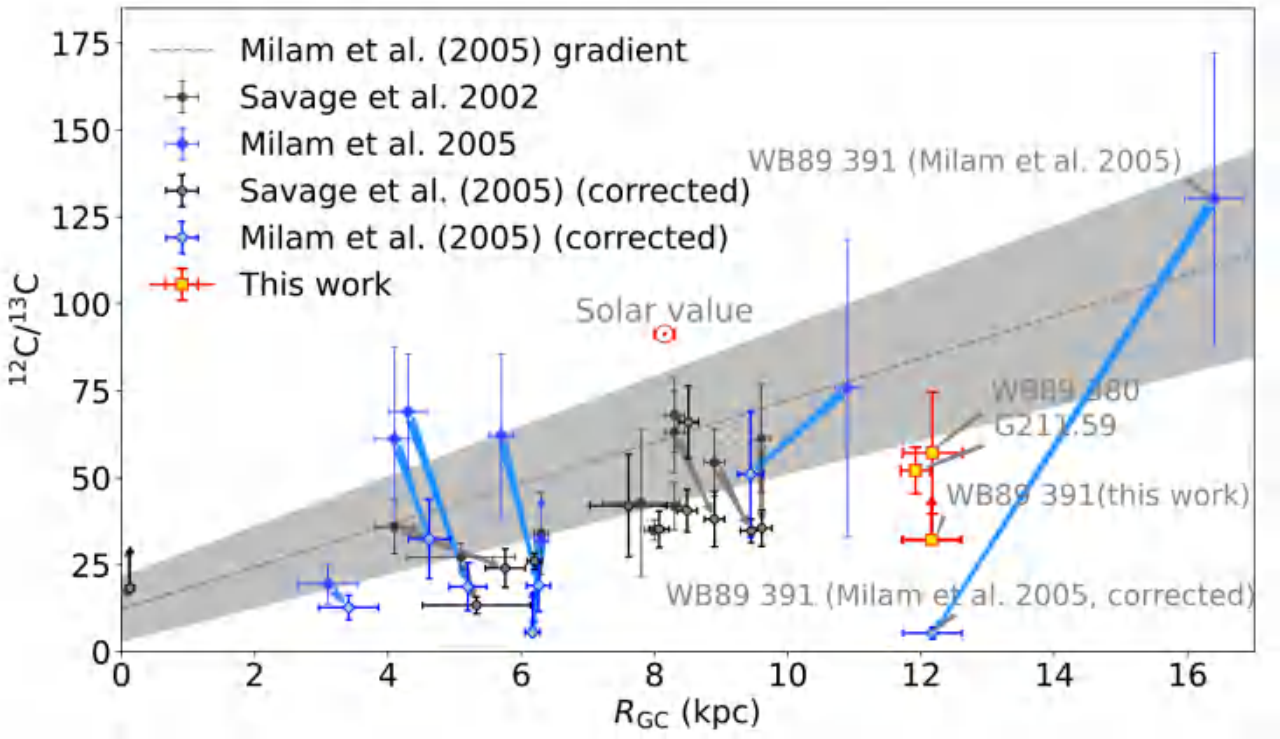


图 1 The ratio of 12C/13C against Galactocentric distance. It shows that the ratios obtained with "classical HfS" method would drop dramatically after corrections, indicating that this method should not be adopted.

AGB 星星周 PAHs 分子研究

李小虎 [1*]

[1] 中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐市新市区科学一街 150 号，830011
*Email: xiaohu.li@xao.ac.cn

1973年，Gillett等人首次在行星状星云中观测到了多环芳烃（PAHs）在11.3微米的发射谱[1]。随后，天文学家在红外波段多次观测到了PAHs的特征谱线[2]，并开展了诸如模拟[3]、实验[4]、及人工智能[5]等方面的研究。然而，红外波段的研究难以精确证认PAHs分子的具体种类，因此难以揭示PAHs的星际起源机制。近年来，天文学家借助大型射电望远镜在冷分子云TMC-1中观测并精确证认出了部分PAHs相关分子[6,7]，实验物理化学家通过实验手段测量了此类PAHs的主要形成路径，天体化学家则结合实验结果，利用模型成功解释了部分PAHs的射电观测结果并预测了未来可能探测到的PAHs的种类与丰度，为PAHs星际起源之谜提供了思路[8,9]。

渐近支巨星（AGB星）是中低质量恒星（0.8 - 8 $M_{\odot}$）演化后期的关键阶段，其星周包层（CSE）以气体和尘埃为主要成分[10]，在其中已观测证认出110余种原子、分子及离子[11]，其中可形成PAHs的有机小分子丰度较高，预示AGB星周可能蕴藏着丰富的PAHs[12]。本报告将扼要梳理上述进展，介绍AGB星CSE中潜在的PAHs分子的可能起源，并分析该领域面临的机遇与挑战（尤其是光化学方面）。

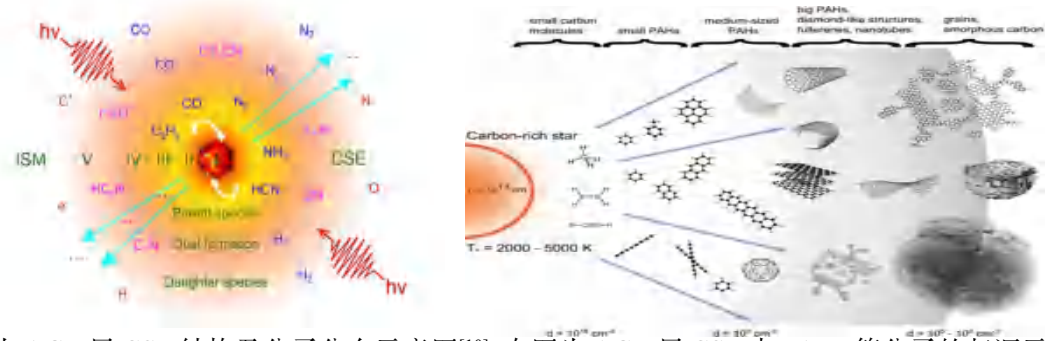


图 1: 左图为 AGB 星 CSE 结构及分子分布示意图[10]; 右图为 AGB 星 CSE 中 PAHs 等分子的起源示意图[12]。

关键词：天体化学；AGB星；星周分子；PAHs；形成机制

参考文献：

[1] Gillett, F. C.;Forrest, W. J.; & Merrill, K. M. ApJ, 1973, 183, 87

[2] Tielens, A. G. G. M. ARA&A, 2008, 46, 289

[3] Yang, X. & Li, A. Nature, 2023, 621, 260

[4] Zhen, J.; Candian, A.; Castellanos, P. et al. ApJ, 2018, 854, 27

[5] Meng, Z.; Zhu, X.; Kovács, P. et al. ApJ, 2021, 922, 101

[6] McGuire B. A.; Carroll P. B.; Loomis R. A. et al. Science, 2016, 352, 1449

[7] McGuire, B. A.; Burkhardt, A. M.; Kalenskii, S. et al. Science, 2018, 359, 202

[8] Kaiser R.I., Zhao L., Lu W. et al. Phys Chem Chem Phys, 2022, 24, 25077

[9] Yang Z.; Galimova G. R.; He C. et al. Science Advances, 2023, 9 (36), eadi5060.

[10] Li, X.; Millar, T. J.; Walsh, C. et al. A&A, 2014, 568, A111

[11] Tuo, J.; Li, X.; Sun, J. et al. ApJS, 2024, 271, 45.

[12] Contreras C. S. & Salama, F. ApJS, 2013, 208:6

面向天文应用的太赫兹超导热电子混频器技术

缪巍[1,*]，周康敏[1]，张文[1]，李婧[1]，史生才[1]

[1]中国科学院紫金山天文台，南京市栖霞区元化路 10 号，210033
*Email: weimiao@pmo.ac.cn

摘要正文：超导热电子（Hot Electron Bolometer, HEB）混频器是一种基于微纳尺度超导薄膜电阻-温度非线性效应的高灵敏度、宽瞬时带宽外差混频器，兼具射频频率相关性弱和低本振功率需求的优点，是目前 1 THz 以上频段灵敏度最高的外差混频器，已成功应用于 APEX 地基望远镜、Herschel 空间望远镜及 SOFIA 空基望远镜。自 2000 年起，中国科学院紫金山天文台开展了超导 HEB 混频器技术研究，阐明了其太赫兹波吸收等关键机理，并成功研制面向南极太赫兹望远镜的 1.4 THz 高灵敏度超导 HEB 混频器，实测噪声温度优于 7 倍量子噪声，达到国际领先水平。近期，团队在 GaAs 衬底上实现了天线耦合型中红外（10 μm）HEB 混频器，是目前最高频率的超导 HEB 混频器。此外，团队还开展了超导 HEB 混频器与太赫兹量子级联激光器（QCL，本振信号源主流选择）的集成研究，实现了在同一 4 K 低温环境下的超导 HEB 混频器与太赫兹 QCL 的集成。本文系统介绍了中国科学院紫金山天文台在超导 HEB 混频器机制、器件制备与表征、以及应用系统方面的研究进展。

Identifying and characterizing cold cores on the verge of high-mass star formation

Keping Qiu[1,*]

[1]Nanjing University, 163 Xianlin Avenue, Nanjing，210023
*Email: kpqiu@nju.edu.cn

Since the 1990s, the study of high-mass star formation has become a hot topic in the field of star formation. Different theoretical models of high-mass star formation have significantly different initial conditions; therefore, observationally identifying prestellar molecular cloud cores that give birth to high-mass stars and revealing their physical and chemical properties is key to distinguishing between different physical models. However, existing studies in the context have been strongly biased to protostellar objects, which are usually brighter and more centrally concentrated. Here I will introduce our efforts in hunting for massive prestellar cores and follow-up studies in revealing the fragmentation and dynamical properties of those cores, focusing on high-resolution maps of dust continuum and specific molecular spectral line emissions, and discuss the implications on our understanding of high-mass star formation.

Keywords: Star formation; High-mass stars; Prestellar cores; Molecular spectral lines

AI 赋能天体化学建模研究进展

全冬晖[1*]，卢杨[1]，张天惟[1]，王佳玮[1]，邱逸盛[1]，张亚楠[1]，卜海丽[1]，高宝全[1]

[1]之江实验室，浙江省杭州市余杭区文一西路 2880 号，311121
*Email: donghui.quan@zhejianglab.org

天体化学研究的核心在于理解星际分子的形成、演化与消耗机制。然而，星际介质中已探测到的约 330 种分子所涉及的反应路径复杂，场景特殊，传统反应网络规模有限、且更新周期长、跨源数据不统一，制约了对星际化学过程的系统刻画。为此，我们围绕“数据—模型—观测”闭环，开展了一系列基于智能计算的天体化学建模探索。首先，我们正在建设星际化学反应数据平台 ChemiVerse，旨在整合公开文献、实验与理论计算结果，构建目前规模最大的星际介质化学反应网络。在此基础上，我们开发了 GraSSCoL（Graph-to-SMILES & Supervised Contrastive Learning），利用图表示与对比学习框架对反应路径进行智能拓展，可在保持物理化学合理性的前提下高效生成可能的反应通道，为多相化学建模提供新的候选反应集。面向观测端，我们构建了自动光谱识别工具 Spectuner，在天文观测分子谱线自动拟合与快速筛查中取得显著进展，大幅提升谱线识别的效率。与此同时，我们正在建设星际分子光谱库 SpectroVerse，融合实验、理论与 AI 生成光谱数据，为天文观测解释与反演建模提供支撑。这一系列工作，为星际化学反应网络构建、多相化学模型扩展以及观测数据智能解译提供了新的路径，推动 AI 赋能天体化学迈向体系化、自动化与可扩展的新阶段。

关键词：星际分子；建模；智能计算

参考文献：

[1] Wang, J. et al. *Intelligent Computing,* 2025, 4: 0118.

[2] Qiu, Y. et al. *ApJS,* 2025, 277: 21.

[3] Gao, B. et al. *Chinese Space Science and Technology*, 2025, 45, 14.

[4] Zhang, Y. et al. *Chinese Space Science and Technology*, 2025, 45, 22.

离子-分子转动传能动力学

高蕨 [1, 2]

[1] 中国科学院化学研究所，北京分子科学国家研究中心，北京市海淀区中关村北一街 2 号，100190
[2] 中国科学院大学，北京市石景山区玉泉路 19 号甲，100049
*Email: honggao2017@iccas.ac.cn

分子之间的转动传能过程广泛存在于行星大气、星际空间、等离子体等复杂的气相环境中，深入研究其动力学机理，对理解上述复杂气相环境的化学性质和演化有重要意义。目前，中性原子和分子之间的转动传能动力学研究已经达到“态-态”分辨水平，深刻揭示了原子分子之间的相互作用机制。相对于中性原子和分子，离子和分子之间的碰撞传能动力学研究则要滞后很多。离子和分子之间通常有较强的长程相互作用，且势能面上通常有深势阱，理论研究有更大的挑战性；实验上，低能离子束难以控制，产物测量的能量分辨率较低，难以获得“态-态”分辨的动力学信息。本报告将介绍我们用基于激光电离选态和三维离子速度成像技术的离子-分子交叉束装置[1, 2]所取得的两项进展：（1）在前期关于 $Ar^+(^2P_{3/2,\,1/2})$和 N_2 之间电荷转移和传能动力学研究基础上[3-5]，对仪器和离子束源进行了进一步优化，并获得了更好的后向产物能量分辨率，如图 1 所示。在优化的散射图后向可以分辨出两个明显不同的产物转动激发分布，通过准经典轨线计算发现，这是由电荷转移的立体动力学效应造成的。（2）对电荷转移反应 $Ar^+(^2P_{3/2,\,1/2})+H_2 \rightarrow Ar+H_2^+(v', J')$实现“态-态”分辨的动力学测量，结合量子动力学和准经典轨线计算发现，其相互作用势能面上的深势阱在转动能量传递中起到了主导作用，使其与教科书中传统的硬球碰撞模型预测的机理有显著的不同。

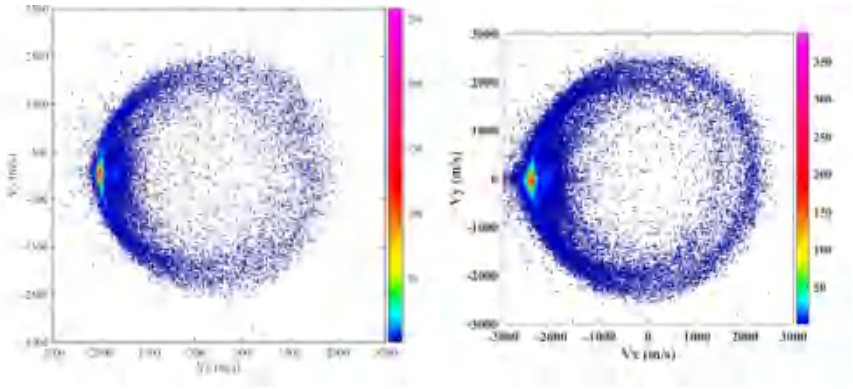


图1：优化前（左）和优化后（右）电荷转移反应$Ar^+(^2P_{3/2})+N_2 \rightarrow Ar+N_2^+(v', J')$在1.6 eV碰撞能下的散射图

关键词：离子–分子反应；转动传能；立体动力学；交叉分子束；三维离子速度成像

参考文献：

[1] Zhang, G., Guan, L., Yan, Z., Cheng, M. & Gao, H. *Chin. J. Chem. Phys.* 2021, 34: 71.

[2] Zhang, G., Guan, L., Cheng, M. & Gao, H. *Rev. Sci. Instrum.* 2021, 92: 113302.

[3] Zhang, G., Lu, D., Ding, Y., Guan, L., Han, S., Guo, H. & Gao, H., *Nat. Chem.* 2023, 15: 1255.

[4] Zhang, G., Lu, D., Guo, H. & Gao, H. *Nat. Commun.* 2024, 15: 1001.

[5] Zhang, G., Lu, D., Guo, H. & Gao, H. *Nat. Commun.* 2024, 15: 8177.

早期太阳系氧同位素异常的困惑

林莽 [1*]

[1] 中国科学院广州地球化学研究所，广州，510640
*Email: linm@gig.ac.cn

富钙铝包裹体（CAIs：calcium-aluminum-rich inclusions）是太阳系早期星云最早凝固的固体物质，因此保存了早期太阳系星子形成初始阶段的关键信息。Clayton 等（1973）首次对碳质球粒陨石 Allende 的 CAIs 进行三氧同位素分析，发现其$\delta^{17}O/\delta^{18}O$ 呈现斜率约为 1 的关系，而非同位素地球化学经典理论预测质量依赖分馏关系（即$\delta^{17}O/\delta^{18}O=0.52$）。经过半个世纪的研究，学界认为原行星盘中 CO 的光化学自屏蔽效应是解释这一观测现象的最优解，针对太阳系早期过程和三氧同位素的大部分研究，均以该模型作为数据解读的立足点。尽管“CO 光解”模型已经广泛接受和确立为主流模型，但学界在将 CO 光解同位素效应的化学机制引入到地球和行星科学研究时，存在一定程度的简化（Thiemens and Lin，2021）。本报告将论述主流模型可能存在的问题，以及未来可能的解决方案。

关键词：早期太阳系，三氧同位素，一氧化碳光解，自屏蔽效应

参考文献：

[1] Clayton RN, Grossman L, Mayeda TK (1973) Component of primitive nuclear composition in carbonaceous meteorites. Science 182:485–488

[2] Thiemens MH, Lin M (2021). Discoveries of mass independent isotope effects in the solar system: past, present and future. Reviews in Mineralogy and Geochemistry 86:35–95

邀请报告

低温气相下 CH·与含氧化合物反应动力学研究

李宏伟[1,*]，周飞跃[1]，T. J. Millar[2]，杨学明[1,3]

[1] 化学反应动力学全国重点实验室，中国科学院大连化学物理研究所，大连，116023
[2] Queen's University Belfast, Belfast BT7 1NN
[3] 南方科技大学理学院，深圳，518055
*Email: lihw@dicp.ac.cn

在天体化学中，复杂有机分子（COMs）被定义为含碳且由六个或更多原子组成的分子，它们在星际介质（ISM）中被广泛探测到，主要是在暗云、低质量和高质量的恒星形成区域。其中，含氧复杂有机化合物（O-COMs）几十年来一直受到广泛研究，因为它们在简单原子/分子与前生命物种之间起着桥梁作用。但长期以来，科学家们对这些含氧复杂有机化合物在极端低温环境下的形成和演化机制知之甚少。我们利用拉瓦尔低温束流技术结合激光诱导荧光探测和光电离质谱探测技术对低温下 CH·与 CH_3OCH_3、CH_3CHO 等含氧有机化合物反应动力学进行研究[1,2]。天体化学模型对金牛座分子云（TMC-1）模拟结果显示，CH· + CH_3CHO 反应能够很好地解释观测到的甲基乙烯酮和丙烯醛的星际丰度。该研究揭示了寒冷星际环境中 O-COMs 形成的新机制，为理解宇宙中复杂分子的起源和演化提供了新线索。

关键词：低温气相反应动力学；含氧复杂有机化合物；光电离质谱探测；拉瓦尔低温反应装置

参考文献：

[1] Zhou, F.; Ma, S.; Li, L.; Zhang, J.; Xiao, C.; Dong, W.; Li, H. *J. Chem. Phys.* 2025, 162: 094201.

[2] Zhou, F.; Li, C.; Zhang J.; Zhang, W.; Dong, W.; Yang, X.; Li, H. *Chin. Chem. Lett.* 2025, accepted.

时间延迟速度成像研究星际氧冰和一氧化碳冰光脱附动力学

孙中发*[1]，丁国庆[1]，David H. Parker[1,2]

[1] 物理系，安徽师范大学，安徽省芜湖市九华南路 189 号，241002

[2] Department of Molecular and Laser Physics, IMM, Radboud University, Heyendaalseweg 135, 6525 AJ Nijmegen, the Netherlands

*Email: zfsun@ahnu.edu.cn

摘要正文：星际分子冰面上发生的光致脱附过程是星际气相分子的重要来源，在星际化学的演化与发展中发挥着关键作用。对分子冰面光脱附产物和中间体进行原子分子尺度和量子态水平上的精准探测研究对于揭示光脱附的微观机制至关重要。为此，我们首次将表面速度成像技术（Surface Velocity Map Imaging, Surface-VMI）应用到冷环境下含氧分子冰面的光化学实验研究中，结合激光选态电离技术，建立了一套新型的时间延迟质谱（time-delayed mass spectroscopy, TD-MS）与时间延迟速度成像（time-delayed VMI, TD-VMI）方法。利用这套高灵敏、高分辨探测方法，我们成功测量了低温环境下星际化学相关重要分子冰面（O_2 冰、CO 冰）光诱导脱附产物（$O(^3P)$、$O(^1D)$、O_2、O_2^*、CO*等）的质量分布、平动能分布和空间角分布，进而准确获得了相应中间体分子的物种、量子态布居、通道分支比等重要的动力学信息，结合分子动力学模拟，清晰地揭示了星际含氧小分子冰面在不同光场条件下的光脱附微观机制。这套方法可以为量子态分辨的表面光物理光化学机理和动力学研究提供强有力的工具。

关键词：表面速度成像；时间延迟质谱；量子态分辨；星际氧冰；一氧化碳冰

参考文献：

[1] Scheidsbach, R. J. A.; Parker, D. H. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21: 14278.

[2] Del Fre, S; Santamaria, A. R.; Duflot, D.; *et al*, *Phys. Rev. Lett*, 2023, 131: 238001.

[3] Sun, Z. F.*; Scheidsbach, R. J. A.; Banerjee, A.; *et al*, *J. Chem. Phys.*, 2025, 162: 054306.

[4] Sun, Z. F.*; Ding, G. Q.; Hua, Z. F.; Cuppen, H.; Linnartz, H.; Parker, D.H. (to be submitted)

Single Photoionization Induced the Ion-molecular Reaction in Prebiotic Molecules Complex

Yongjun Hu*, Yujian Li, Xie Min

MOE Key Laboratory of Laser Life Science & Guangdong Provincial Key Laboratory of Laser Life Science, Guangzhou Key Laboratory of Spectral Analysis and Functional Probes, College of Biophotonics, South China Normal University, Guangzhou 510631, China

*Email: yjhu@scnu.edu.cn

Gas-phase reactions of interstellar molecules are important to the evolution of the prebiotic molecules in space. Acrylonitrile ($CH_2CHC{\equiv}N$, AN) is one of the most abundant unsaturated nitriles in the interstellar medium. Due to the C=C and C≡N bond, which may have an even greater reactivity when exposed to cosmic radiation. Herein, we report a mass-selected infrared (IR) spectroscopic study of the reactions of the gas-phase acrylonitrile-containing complex based on VUV single photoionization. We found a possible pathway leading to the formation of the nitrogen-containing prebiotic molecules through the single-photon ionization-induced sequential addition/cyclization reactions of acrylonitrile ($CH_2CHC{\equiv}N$, AN) clusters. For $(AN)_{2,3}$ and $(AN)_{1,2}$-NH_3, it is found that a new C-N covalent bond is formed in the clusters via the direct addition reaction after 118 nm light ionization. In the meanwhile, for AN- pyrrole (AN-Py) cluster clusters, a new C-C covalent bond between two moieties in $(AN\text{-}Py)^+$ is formed. Particularly, our recent investigation on the AN-alcohols clusters shows that nitrilium cations and even cyclic amine cations with a peptide bond can be generated through the single-photon ionization-induced sequential Michael addition/cyclization reactions. Moreover, the new C-C or C-N covalent bonds tend to be formed between two Py via the direct addition reaction after 118 nm light ionization. This study is helpful in deeply understanding the formation of prebiotic N-containing molecules in outer space.



Fig. 1 Reaction pathway of N-containing prebiotic molecules complex under VUV light.

Keywords：IR spectroscopy, VUV, Single photo ionization, Clusters, Mass spectroscopy

References：

[1] Xie, M.; Sun, S.; Hu, Y. et al *J. Phys. Chem. Lett.*, 2022, 13, 8207-8213.

[2] Wu, B.; Li, Y.; Xie, M.; Hu, Y. et al *J. Phys. Chem. A* 2025, 129, 3012−3019.

激光光谱方法在反应动力学及离子光谱研究中的应用

董文锐

中国科学院大连化学物理研究所，大连市中山路 457 号，116023
*Email: wrdong@dicp.ac.cn

我们发展了高重复频率（工作频率为10 kHz）激光诱导荧光（LIF）方法，用于测量能解离产生LIF可检测产物的物种的反应动力学。高重复频率使得能够快速积累数千次激光脉冲，实现高灵敏度和优异的信噪比。我们通过监测Criegee中间体(CIs)的单分子分解产生的OH自由基来获得CIs的双分子及单分子反应速率信息，其中OH的时间分布直接反映了CIs的衰减动力学。这种技术将传统的LIF测量扩展到那些无法直接检测但在分解时产生LIF活性片段的物种，为研究反应中间体提供了一种灵敏的时间分辨方法，在星际化学，大气化学和燃烧化学中具有应用前景。

以CIs *syn*-CH_3CHOO为例，我们研究了其与水的反应动力学。之前的理论计算认为*syn*-CH_3CHOO与水反应较慢，反应速率在$10^{-19}cm^3s^{-1}$量级；实验上也只给出了该反应速率的上限。我们的实验以及高精度的理论计算表明，该反应的速率比以前的预测值大了三个量级，差异源于在反应入口通道的漫游机理。[1] 我们发现，考虑到和CIs的反应后，全氟异丁腈（$(CF_3)_2CFCN$）在大气中的寿命缩短为之前预测值的4%-50%（差异源于全球不同区域克里奇中间体浓度及组分的变化），为评估$(CF_3)_2CFCN$替代电力设备中常用的六氟化硫绝缘气体提供了科学依据。[2]

此外，我们发展了结合极紫外光电离与红外光解离的实验方法，实现了对*syn*-和*anti*-CH_3CHOO构象异构体分辨的红外光谱测量，[3] 展示了该技术在识别分子构象差异方面的普适性，在大气化学和星际化学等领域具有广泛应用前景。

关键词：反应动力学；反应速率；红外光谱

参考文献：

[1] Liu, Y.; Liu, L.; Fu, Y.; Jiang, H.; Wu, H.; Liu, Y.; Lu, X.; Zhou, X.; Li, H.; Skodje, R. T.; Wang, X.; Fu, B.*; Dong, W.*; Zhang, D.*; Yang, X.*. *Nat Chem* **2025**. DOI: 10.1038/s41557-025-01798-9

[2] Jiang, H.; Xie, C.; Liu, Y.; Xiao, C.; Zhang, W.; Li, H.; Long, B.*; Dong, W.*; Truhlar, D. G.*; Yang, X.*. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147* (14), 12263–12272. DOI: 10.1021/jacs.5c01737

[3] Huang, E.; Zhong, L.; Xue, J.; Zhou, X.; Liu, S.; Che, L.; Li, H.; Fan, H.*; Dong, W.*; Yang, X.*. *Nat Commun* **2025**, *16* (1), 2313. DOI: 10.1038/s41467-025-57670-4

真空紫外光电离质谱及应用研究

唐小锋*

中国科学院合肥物质科学研究院，安徽光学精密机械研究所，合肥，230031

*Email: tangxf@aiofm.ac.cn

摘要正文：通过发展先进的光电离飞行时间质谱技术，以真空紫外放电灯和同步辐射光作为电离源，自主研制了高性能的真空紫外光电离 VOCs 质谱仪、自由基质谱仪和纳米颗粒物气溶胶质谱仪等仪器，结合多种化学反应器，将之应用于大气环境、生物质热解和烟气气溶胶成分检测等领域，实现了实际环境大气中 VOCs 的外场快速测量，以及复杂反应体系中的反应物、产物和自由基等关键物种以及颗粒物成分的在线检测，并通过光电离效率谱和光电子谱测量，获得了物种的同分异构体结构信息，进一步揭示了详细的反应机理。

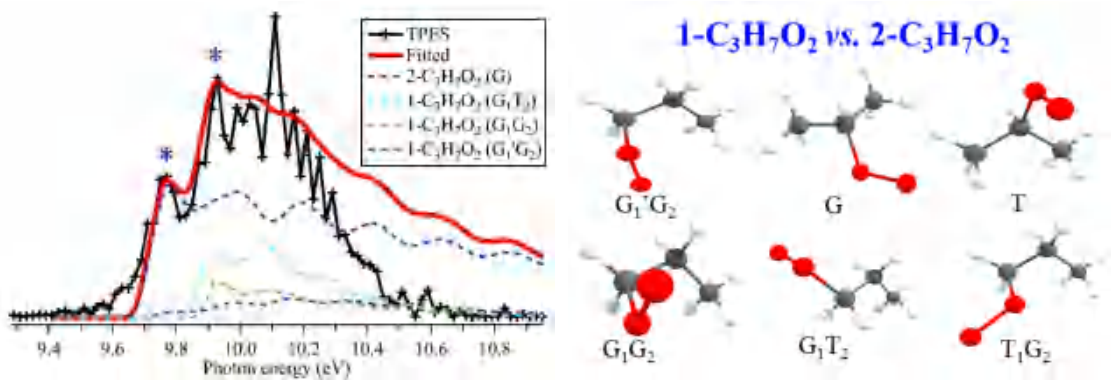


图1：过氧自由基的同分异构体检测区分

关键词：光电离质谱；自由基；VOCs；纳米颗粒物；同步辐射

参考文献：

[1] Zhao, F.; Wang, J.; Zhen, L.; Tang, X.* et al.; *Journal of Hazardous Materials*, 2025, 499: 140085.

[2] Lin, X.; Liu, L.; Xia, Y.; Wen, Z.; Tang, X.* et al.; *Science of the Total Environment*, 2025, 1003: 180721.

[3] Tang, X.*; Lin, X.; Garcia G.; Loison, J-C et al.; *Chem. Commun.* 2020, 56: 15525

大气含碘颗粒物形成机制

张秀辉*
北京理工大学化学与化工学院，北京，100081
Email: zhangxiuhui@bit.edu.cn

摘要：全球碘排放量快速上升，其对环境和人类健康的影响日益凸显。研究表明，碘酸(IA)是海洋边界层新粒子生成(NPF)的关键驱动因素。尽管在高海拔的自由对流层中广泛检测到IA 颗粒[1]，但其分子形成机制尚不明确。为此，我们采用量子化学计算和大气团簇动力学模型模拟，系统研究了对流层中几种重要前体物参与的 IA 新粒子成核机制。

首先，鉴于酸-碱成核的高效性，研究了大气中重要的碱性物质－二甲胺(DMA)和氨(NH_3)，协同稳定 IA 的 IA-DMA-NH_3 三元体系。结果表明，DMA 和 NH_3 可通过氢键、卤键和离子对间的静电作用与 IA 形成稳定团簇。从海洋边界层到自由对流层，该体系成核速率呈先降后升趋势。路径分析进一步表明：在海洋边界层，IA-DMA 二元成核主导团簇的形成；在自由对流层下层，IA-DMA-NH_3 三元成核成为主要机制；而在自由对流层上层，IA-NH_3 二元成核占主导。这一变化主要由于 DMA 作用随海拔升高而显著降低，而 NH_3 的影响则逐步增强。

其次，考虑到 IA-NH_3 成核在自由对流层上层的重要性，以及硝酸(NA)在对流层上层区域的高浓度分布，探究了 NA 和 NH_3 共同作用下的 IA-NA-NH_3 三元体系。结果表明，NA 和 NH_3 能共同稳定 IA 团簇，且团簇的稳定性和形成速率均高于对流层上层经典的硫酸-硝酸-氨体系[2]。此外，在低温、高 NA 与 NH_3 浓度的对流层上层-平流层下层区域，NA 显著促进 IA-NH_3 成核；而在温度较高的自由对流层中下层，NA 快速蒸发至气相，成核作用较弱。

本研究从分子层面揭示了不同海拔 IA 新粒子成核的主导机制，为在海洋边界层乃至自由对流层广泛观测到 IA 颗粒物提供了潜在来源解释。

关键词：新粒子生成；碘酸；成核机制；海洋边界层；自由对流层

参考文献：

[1] Koenig, T. K.; Baidar, S.; Campuzano-Jost, P.; Cuevas, C. A. et. al. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2020, 117 (4): 1860.
[2] Wang, M.; Xiao, M.; Bertozzi, B.; Marie, G. et. al. *Nature* 2022, 605 (7910): 483.

星际环状含硫分子的生成

朱铖[1,2,3,*]，李智彪[1,2]，李小虎[3]，郑卫军[1,2]

[1] 中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街 2 号，100190
[2] 中国科学院大学，北京市怀柔区雁栖湖东路 1 号，101408
[3] 中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐市新市区科学一街 150 号，830011
*Email: chengzhu@iccas.ac.cn

实验研究星际冰在电离辐射作用下的反应机制，对于了解天体演化过程、认识生命起源问题有重要意义。为此，我们自主搭建了一套星际冰反应模拟实验装置，其主要由超高真空腔室、低温平台、电子或紫外光辐照系统、原位红外光谱、连续可调谐真空紫外光电离质谱等构成。运用该装置，我们研究了低温固态二硫化碳冰（CS_2）在高能电子照射下的反应，光电离质谱在程序升温脱附的分子中探测到了多种环状的 C_4S_6 异构体（图 1），这些复杂的多硫分子可能作为未知的星际硫储库的候选。该工作为理解星际硫缺失问题及合成其他多环含硫化合物提供有用信息。

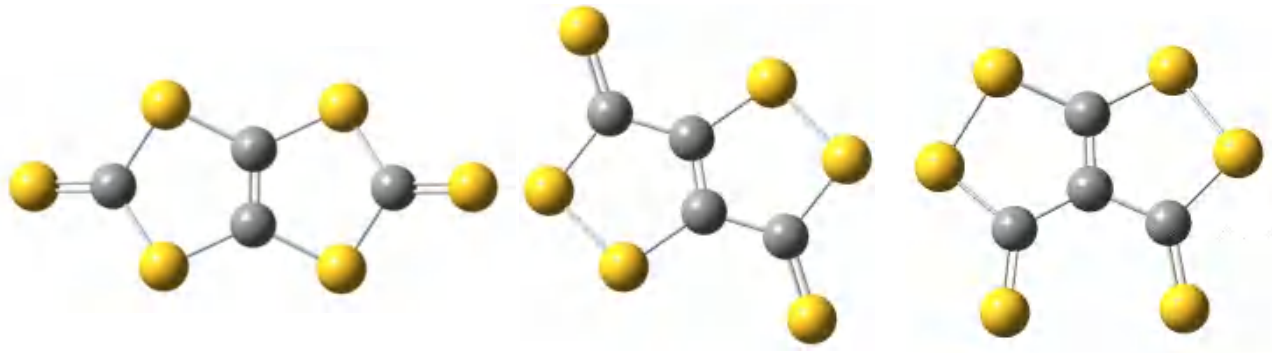


图1：部分多环C_4S_6异构体

关键词：星际冰；环状含硫分子；真空紫外；光电离质谱；异构体

参考文献：

[1] Zhu, C., Wang, H., Medvedkov, I., Marks, J., Xu, M., Yang, J., Yang, T., Pan, Y., Kaiser, R. I. J. Phys. Chem. Lett, 2022, 13: 6875-6882.

[2] Li. Z.; Yang, J.; Gong, X.; Zheng, W.; Zhu, C.; Zhu, C. Phys. Chem. Chem. Phys. 2025, 27: 5961.

The absorption spectrum of He_2 and its predissociation in the near infrared region

Author (San Zhang)[1], Second Author(initial surname.) [2], Corresponding Author(initial surname)[1,*]

Li Chuanliang (李传亮)[1], Deng Lunhua (邓伦华)[2], Qiu Xuanbing (邱选兵)[1], Gong Ting(宫廷)[1], Tian Yali (田亚莉)[1], Wang Yu (王瑜)[1], Chen Yangqin (陈扬骎)[2,*]

[1]School of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan, China
[2]State Key Laboratory of Precision Spectroscopy, and Department of Physics, East China Normal University, Shanghai, China

The near-infrared absorption spectrum of He_2 has been recorded in the range of 12090–13300 cm^{-1} using the optical heterodyne concentration modulation spectroscopy. Fifty-nine He_2 spectral lines were assigned to the (1, 0), (2, 0), (3, 1) and (4, 2) bands in the $c^3\Sigma_g^+$–$a^3\Sigma_u^+$ system and a non-linear least squares fitting was performed to get the improved molecular constants for the levels (v = 1, 3 and 4) in the upper electronic state. The predissociation of the v = 9 level in the $b^3\Pi_g$ state by the $c^3\Sigma_g^+$ state of He_2 was studied based on the newly observed (9, 3) band in the $b^3\Pi_g$ -$a^3\Sigma_u^+$ system in the region of 12065–12445 cm^{-1} employing optical heterodyne-concentration modulation absorption spectroscopy. With the help of the previous potential energy curves and molecular constants of He_2, the corresponding predissociation mechanism for the $b^3\Pi_g$ (v = 9) state was analysed.

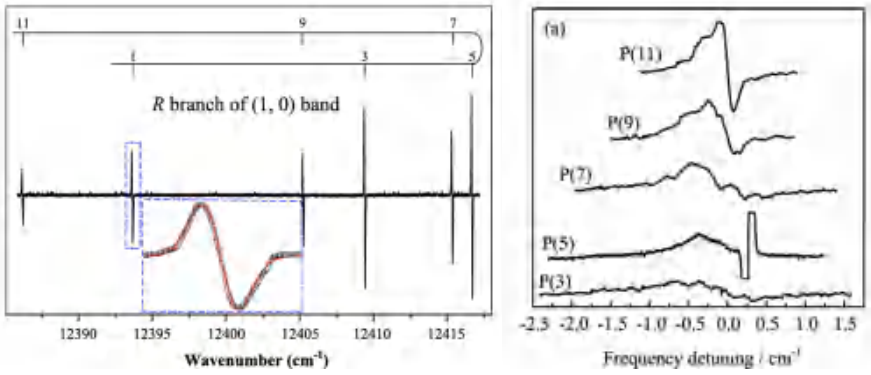


Fig. 1 The observed spectra of He_2 by Optical Heterodyne -Concentration Modulation spectroscopy.[1-2]

Keywords：He_2, pre-dissociation, molecular spectrum

References：

[1] Chuanliang Li, Lunhua Deng, Junli Zhang, Xiaohua Yang, Yangqin Chen*, Longsheng Ma. J. Mol. Spectrosc. 260, 85-87 (2010)

[2] Chuanliang Li, Lunhua Deng, Yan Zhang, Xiaohua Yang, Yangqin Chen*, Chin. J. Chem. Phys. 24, 125-128 (2011).

电子-离子符合成像技术在小分子同分异构体甄别的应用探索

周晓国

[1] 中国科学技术大学化学物理系，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
*Email: xzhou@ustc.edu.cn

伴随着实验技术的不断进步，越来越多的天体分子被逐渐揭示并确认，其中多环芳烃和小分子团簇等复杂分子尤为备受关注，其生成机制可能与宇宙生命起源密切相关。然而，这些复杂物种的生成路径涉及极为复杂的天体化学网络，并且常常具有数目可观的同分异构体。因此，实现其同分异构体的甄别对于准确化学建模和动力学模拟极为重要。相对于小分子体系而言，这些复杂分子同分异构体的微波光谱和红外光谱分析鉴定具有较大的难度，因此，部分模拟实验研究主要还是采用质谱分析，并结合可调谐的真空紫外光电离实现同分异构体的区分。然而，这种基于光电离曲线的质谱技术对于电离能接近或电离截面差距不大的同分异构体区分度有限，仍然具有明显的局限性。

我们在前期的小分子电离解离动力学研究中，发展了阈值光电子-光离子符合成像技术，结合同步辐射真空紫外光电离实现了大量同分异构体的光谱甄别。尤其是在多物种共存的条件下，质量选择的阈值光电子谱（mass-selected threshold photoelectron spectroscopy, ms-TPES）技术能够清晰地呈现各物种（或同分异构体）各自独立的振动光谱信息。在此经验基础上，我们期望能够将这一技术与多环芳烃和小分子团簇等复杂天体分子的定性定量分析相结合，探索其在这些复杂分子同分异构体甄别方面的应用。

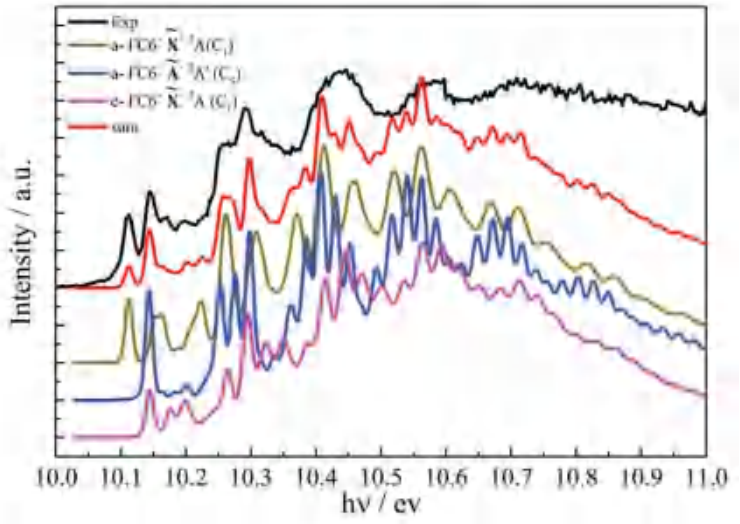


图1：实验和理论模拟的氟代环己烷阈值光电子谱

关键词：阈值光电子谱；Franck-Condon模拟；振动光谱

参考文献：

[1] Wu, X. K., Tang, X. F., Zhou, X. G.,* Liu, S. L.*, *Chin. J. Chem. Phys.* 2019, 31: 11 (Review)

[2] Wu, X. K., Zhou, X. G.,* Hemberger, P., Bodi, A.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2020, 22: 2351

Cold Quantum State Controlled Systems for Interstellar Reaction Dynamics

Tiangang Yang*

Southern University of Science and Technology, Shenzhen, Guangdong 518055, China.

**Email: yangtg@sustech.edu.cn*

Interstellar chemistry takes place under low-temperature conditions where quantum tunneling, resonances, and isotope effects govern molecular reactivity. To probe these processes, we have developed precision-controlled platforms for quantum-state-resolved studies of astrochemically relevant reactions. Using narrow-band lasers, we prepare state-selected reactants such as H_2(v=1), N_2(v=2), and $O_2(b^1\Sigma g^+$, v=1). Our setup integrates a laser-cooled ion trap with high-resolution TOF-MS and fluorescence imaging, enabling sub-kelvin cooling of Be^+ and C^+ ions with accurate micromotion control. These tools allow detailed studies of ion–molecule reactions central to molecular cloud and circumstellar chemistry. Current work explores the roles of vibrational excitation, orientation, and isotope substitution in systems like $BeD^+ + O_2$ and $C^+ + H_2$(v=1). Recent results and future directions highlight the potential of cold, quantum-controlled experiments to reveal the mechanisms shaping interstellar molecular evolution.

Keywords: Astrochemistry, Cold ion–molecule reactions, Quantum state selection

References：

1. Xie, Y.; Han, J.; Wen, L.; et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 2023, 14: 11603.
2. Xiao Y.; Wen L.; Li, Z.; et al, *J. Phys. Chem. Lett.* 2024, 15(46), 11767.
3. Xiao, Y.; Peng, Y.; Chen, L.; et al., *Commun. Phys.* 2024, 7: 423.
4. Xiao, Y.; Wen, L.; Xie, Y.; et al., *Rev. Sci. Instrum.* 2025, *96* (8), 085205-1-9.
5. Peng, Y.; Li, J.; Song, Z.; et al., *JACS Au* 2025**,** *5* (9), 4260-4267.

碳链反应活性与机制：从实验室测量到星际复杂环境

简继文*，王聪，尤涛，李丹阳，聂瑶瑶，高梦香

浙江师范大学，杭州市萧山高教园耕文路 1108 号，31123
*Email: jiwenjian@zjnu.edu.cn

摘要正文：不同尺寸与结构类型的碳链分子(如直链形式的 C_n、C_nHm 以及 HC_nN 等)的丰度与星际环境的物理条件（如密度、温度、辐射场强度）密切相关。随着云核进一步坍缩、原恒星逐渐形成，强烈的紫外辐射与激波过程会显著破坏这些碳链结构，导致其丰度迅速下降，与此同时，更为复杂的有机分子开始形成。这些碳链分子的丰度随着分子云的演化及恒星形成过程而发生显著变化，被视作年轻恒星形成区早期化学阶段的特征示踪物。因此，在模拟星际极端环境——如超低温、高真空与紫外辐射共存的条件下——研究碳链分子的形成路径与反应机制，对于追溯宇宙中碳元素从原子态（C）到简单分子（如 CO、C_2H_2），再经由碳链中间体最终迈向生命前体物质的完整演化路径，具有至关重要的科学意义。基于此，本报告将重点介绍如何利用低温基质隔离红外光谱技术，深入探究碳链分子的反应活性及其与小分子的作用机理。该研究有望为理解从简单星际分子到复杂有机物的化学演化过程，提供关键的理论与实验依据。

关键词：碳链；反应活性；反应机理；星际分子

高活性含硫星际物种的光谱与反应

蒋鑫，孙蓓蓓，樊一丁，姜俊杰，王丽娜*，曾小庆*

复旦大学化学系，200438
*Email: lina_wang@fudan.edu.cn；xqzeng@fudan.edu.cn

硫化学不仅在生物系统和地球大气中至关重要，在星际介质中同样扮演着重要角色。天文观测表明，分子云中富含二氧化硫（SO_2）和一氧化硫（SO）等硫氧化合物。SO_2 的光化学反应影响行星大气中的硫循环。SO_2 受光激发后形成三重激发态，随后可发生分解产生 SO+O 或 S+O_2，或与分子云中丰富的含氢物种（如 H_2O、NH_3、CH_4）反应。我们采用激光光解与低温原位光谱探测相结合的方法，对 SO_2/H_2S 及 SO_2/NH_3 模型体系的光化学过程进行了研究。与以往提出的 SO_2 先光激发形成激发态再与氢化物反应发生氢迁移的机制不同（HAT，图 1 左），本实验研究发现 SO_2 与 H_2S 和 NH_3 先形成预反应复合物 $H_2S\cdots SO_2$ 和 $H_3N\cdots SO_2$，这些复合物中新形成的分子间 S−S/N−S 键引发电荷迁移，产生一个强于 SO_2 单体电子跃迁的新紫外吸收带。在光激发下，复合物发生质子耦合电子转移（PCET，图 1 左），成功捕获到一直未被实验观测到的关键中间体 HSS(O)OH 及 $H_2NS(O)OH$。随后，HSS(O)OH 和 $H_2NS(O)OH$ 发生氢迁移，分别生成 $S_2O\cdots H_2O$ 和 $HNSO\cdots H_2O$ 复合物。作为 NH_3 与 SO_2 反应的关键中间体，HNSO 分子近期在银河中心分子云 G+0.693−0.027 中被探测到。我们研究 HNSO 的光化学发现两个新颖异构体：*trans*-HNSO 和 *cis*-HONS（图 1，右）。原位红外光谱追踪揭示这两种异构体在极低温（3 K）条件下极不稳定，可自发转化为能量更低的 *cis*-HNSO 和 *cis*-HSNO。同位素取代实验结合路径积分瞬子理论分析证明这两类异构化过程均由量子隧穿效应主导，并预测了 *trans*-HOSN 隧穿形成 *cis*-HOSN 的不稳定性。

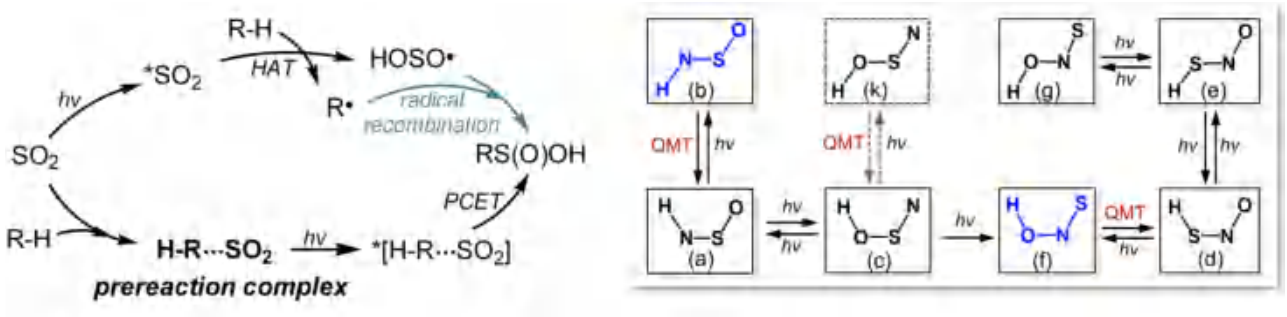


图1：(左) SO_2与含氢分子R−H的光化学反应；(右) [H、N、S、O] 异构体的化学网络。

关键词：极低温；光化学；隧穿；H_2S；SO_2

参考文献：

[1] Xin Jiang,‡ Yiding Fan,‡ Longtian Huang, Yixin Guo, Wei Fang, Lina Wang,* Guntram Rauhut, Xiaoqing Zeng* *J. Am. Chem. Soc.* 2025, *147*, 28173-28178.

[2] Beibei Sun, Junjie Jiang, Xin Shao, Lina Wang*, Tarek Trabelsi, Joseph S. Francisco*, Guntram Rauhut, Junhong Li, Jun Li, Xiaoqing Zeng*, *J. Am. Chem. Soc.* ***2025***, *147,* 32209–32215.

气相离子分子反应势能面构建和动力学研究

李安阳 [1,*]

[1] 西北大学化学与材料科学学院，西安，710127
*Email: liay@nwu.edu.cn

气态离子广泛存在于行星大气和星际介质之中，其与分子之间的反应通常不存在反应势垒，在星际的低温环境下也可以有较大的反应几率，因此离子－分子反应是天体化学实验和理论研究的重要内容。

低温条件下反应对体系势能变化非常敏感，高精度势能面的构建为此类反应提供了可靠的研究平台。近年来，我们运用高水平从头算方法计算反应体系不同区域的能量点，通过神经网络方法拟合数据点，并结合精确的离子分子长程相互作用势，构建了 H_2O^+ /OH^+ /NH^+ /SiO^+ + H_2 和 Be^+ /C^+ /Si^+ + H_2O 等多个反应体系的高精度势能面。基于势能面，使用量子动力学方法和准经典轨线方法计算反应速率常数和产物分支比，应用机器学习的降维和聚类方法对动力学模拟得到的轨线做细致的分析，与实验研究合作，共同深入理解反应的微观机制[1,2]。在众多反应中均发现，反应路径上存在一个或多个潜垒(submerged barrier)。潜垒是指反应势能面上的一个鞍点(saddle point)，其能垒高度低于反应入口通道。虽然潜垒不像过渡态势垒那样主导反应的进行，但它是反应的瓶颈，在化学反应动力学中扮演着复杂的角色，可能导致非传统的反应路径和动力学特性[3]。

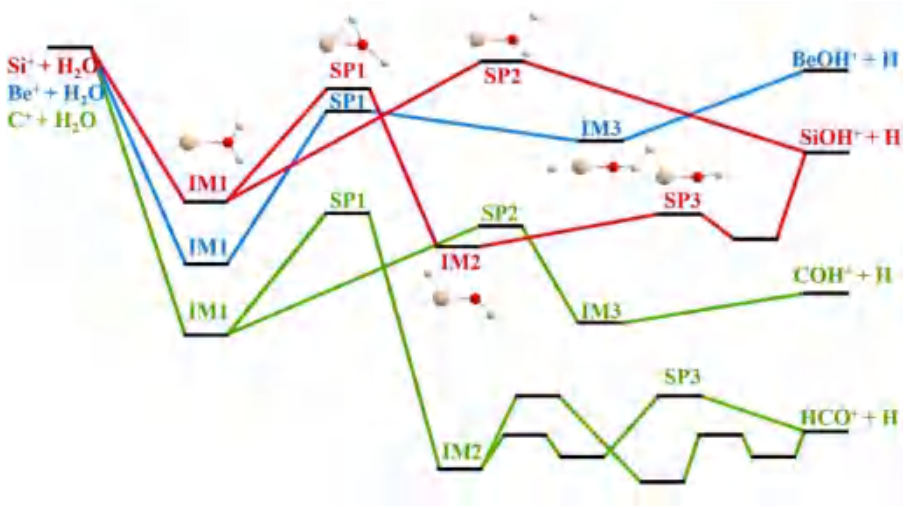


图1： Be^+ /C^+ /Si^+ + H_2O 反应的势能面示意图

关键词：离子分子反应；势能面；潜垒

参考文献：

[1] Yang, T.; Li, A.; Chen, G. K.; Yao, Q.; Suits, A. G.; Guo, H.; Hudson, E. R.; Campbell, W. C., *Sci. Adv.* 2021, 7: eabe4080.

[2] Venkataramanababu, S.; Li, A.; Antonov, I. O.; Dragan, J. B.; Stollenwerk, P. R.; Guo, H.; Odom, B. C. *Nat. Commun.* 2023, 14: 4446

[3] Li, R.; Gao, T.; Zhang, P.; Li, A., *J. Phys. Chem. A* **2024, 128:** 2376.

甲烷与 H/O/Cl 原子反应中的振动汇报模式

赵斌[1,*]，Uwe Manthe[2]，张东辉[3]

[1] 南方科技大学理学院化学系，深圳 518055

[2]Theoretische Chemie, Fakultät für Chemie, Universität Bielefeld, Bielefeld 33615, Germany

[3] 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，大连 116023

*Email: zhaobin@sustech.edu.cn

在多原子反应中，只有部分原子直接参与反应。研究多原子分子中不直接反应的部分对化学反应的影响具有重要的研究价值，有助于揭示其中特殊的量子效应和动态学过程。甲烷与原子的反应是六原子基准基元反应，已有一系列详细的实验研究，但是精细的量子动态学理论研究相对欠缺。在精确势能面上开展态-态量子动态学研究能够提供精确的研究结果。本报告将重点介绍该反应中特殊的伞形弯曲振动模式。该振动模式同时存在于反应物和产物中，并不直接参与断键和成键过程，但是其平衡位置和振动频率在反应中发生显著的变化，因而伞形弯曲振动能够成为一个监视反应过程的汇报模式，在不同的反应条件下，在甲烷和 H/O/Cl 反应中，通过分析产物伞形弯曲振动态分布，研究甲烷振动模式选择、空间取向以及非绝热效应等，发现和总结多原子反应体系的基本规律，同时发掘多原子体系更加丰富的量子动态学过程。

最近，我们对 D + CH_4 反应进行了实验和理论研究，并证实了 CH_3 的伞形弯曲模式可作为一种报告模式，用以揭示 D 原子与 CH_4 的动态接近过程 [1]。具体而言，我们测量和计算了特定伞形弯曲振动状态 CH_3(v'=0,1)的产物角分布，实验与理论结果吻合很好。研究发现 CH_3(v'=1)产物态比 CH_3(v'=0)产物态更倾向于分布在前向。通过分析不同分波的伞形弯曲波函数，我们对此现象进行了分析，并进一步证实了该 CH_3 伞形弯曲振动模式的汇报功能，其示意图如图 1 所示。

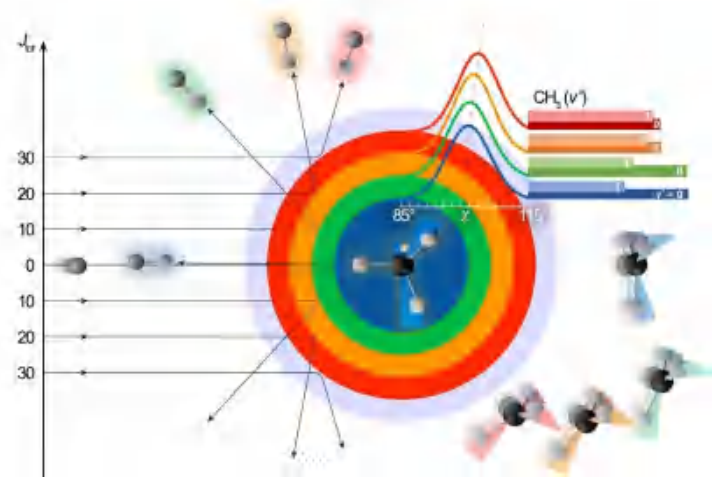


图1： D + CH_4 反应中CH_3伞形弯曲振动汇报模式的示意图。

关键词：量子反应动态学；振动汇报模式；甲烷；微分散射截面；含时波包

参考文献：

[1] Yuxin Tan, Bin Zhao*, Daofu Yuan, Fan Li, Shanshan Yu, Mengda Jin, Yu Zhang, Chang Luo, Wentao Chen, Tao Wang, Jikai Zhu, Ziwei Wang, Tiangang Yang, Shu Liu, Uwe Manthe, Xingan Wang*, Dong H. Zhang*, and Xueming Yang*, “Revealing umbrella bending as a reporter mode in the D + CH4 reaction”, Nat. Commun. 16, 5893 (2025)

Criegee 中间体的大气化学反应动力学

Bo Long[1]

[1] 贵州民族大学材料科学与工程学院，贵阳，550025
*Email: wwwltcommon@sina.com

Criegee 中间体在大气中起着重要作用，它是夜间 OH 自由基的主要源，且对二次有机气溶胶的形成有重要贡献。此外，它也是大气中重要的氧化剂，引发了大气中许多重要分子的汇。例如，Criegee 中间体氧化二氧化硫转化成三氧化硫，从而促进大气硫酸盐气溶胶的生成。Criegee 中间体的反应动力学是阐明大气化学转化过程的关键。然而，由于实验方法只能研究小尺寸 Criegee 中间体在较小温度范围内的反应，因此 Criegee 中间体的反应动力学参数十分有限。虽然理论方法为获得 Criegee 中间体的定量动力学提供了一种手段，但 Criegee 中间体具有多参考特征，导致 CCSD(T)方法的不确定性很大。因此，我们发展了理论方法并设计了二级策略来获得 Criegee 中间体与大气分子及其单分子反应的反应动力学参数和机理信息，建立模拟大气中复杂反应体系的理论框架，获得实验精度的大气化学反应动力学参数，并将计算获得的大气化学反应动力学参数耦合到全球大气化学传输模式中，探索其对大气氧化性及大气成分的影响。

关键词：Criegee 中间体

参考文献：

[1] Long B, Bao, JL, Truhlar DG. Atmospheric Chemistry of Criegee Intermediates: Unimolecular Reactions and Reactions with Water. J. Am. Chem. Soc. 2016;138:4409-14422

[2] Long B, Bao JL, Truhlar DG. Unimolecular reaction of acetone oxide and its reaction with water in the atmosphere. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2018;115:6135-6140

[3] Long B, Bao JL, Truhlar DG. Rapid unimolecular reaction of stabilized Criegee intermediates and implications for atmospheric chemistry. Nat. Commun. 2019;10:2003

[4] Long B, Wang Y, Xia Y, He X, Bao JL, Truhlar DG. Atmospheric Kinetics: Bimolecular Reactions of Carbonyl Oxide by a Triple-Level Strategy. J. Am. Chem. Soc. 2021;143:8402-8413

[5] Xia Y, Long B*, Lin S, Teng C, Bao JL, Truhlar DG. Large Pressure Effects Caused by Internal Rotation in the s-cis-syn-Acrolein Stabilized Criegee Intermediate at Tropospheric Temperature and Pressure. *J. Am. Chem. Soc.* 2022;144:4828-4838

[6] Long, B.*; Zhang, Y.-Q.; Xie, C.-L.; Tan, X.-F.; Truhlar, D. G.*, Reaction of Carbonyl Oxide with Hydroperoxymethyl Thioformate: Quantitative Kinetics and Atmospheric Implications. Research 2024, 7, 0525.

[7] Long, B.*; Xie, C.; Truhlar, D. G*. Criegee Intermediates Compete Well with OH as a Cleaning Agent for Atmospheric Amides. J. Am. Chem. Soc.2025, 147, 22237-22244.

大气氦激光雷达光源及探测关键技术研究

赵东锋 [1,2*]

[1] 合肥国家实验室，安徽合肥 230088
[2] 中国科技技术大学未来技术学院，安徽合肥 230026
*Email: dzhao@ustc.edu.cn

摘要正文：在地球大气层热层与电离层中存在一定数量处于 2^3S 能级的氦原子，通过观测大气中亚稳态氦的空间分布与动力学特性，对于深入理解高层大气活动规律、探讨大气-深空物质输运与演化机制具有重要的科学价值。近年来，氦共振荧光激光雷达作为一种新兴的高层大气探测技术，开始进入科学观测阶段。由于大气中亚稳态氦原子密度极低，为提升雷达信噪比及反演数据的精度，氦共振荧光激光雷达在高能窄线宽光源、数据反演方法以及新型探测技术的实验验证方面仍存在挑战。针对上述技术难点，我们自主研制了适用于氦共振荧光激光雷达中的 1083 nm 激光光源，于 2023 年集成应用于我国子午工程二期(空间环境地基综合监测网)重点设备 - 阵列式大口径激光雷达，首次实现大气层 200-1000km 高度范围亚稳态氦数探测。并在实验室发展氦共振荧光激光雷达模拟装置，依托该装置进行针对亚稳态氦的饱和吸收效应研究，并基于激光参数完成三频选择及测温测风误差分析，为氦雷达观测数据解析提供理论基础，并为未来发展星载氦雷达设备提供指导。

关键词：大气激光雷达，热层大气，亚稳态氦原子，脉冲激光器，实验室模拟

分子的精密激发和测量

程存峰[1*]，张寒辉[2]，王少培，喻萌翌，胡水明[1]

[1] 合肥微尺度物质科学国家研究中心，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
[2] 深圳先进光源研究院，深圳市光明区新湖街道圳园路 268 号，518107
*Email: cfcheng@ustc.edu.cn

腔增强光谱技术是近年来发展的精密光谱技术，推动了痕量分子同位素检测、分子精密光谱测量、分子反应物激发与产物探测等一系列前沿领域的发展。通过将连续激光与高精细度光腔锁定，可同时实现极高的光谱探测灵敏度与光腔内等效功率，这种激光锁腔的腔增强技术适用于分子振动激发与精密光谱探测。制备反应物的高振动激发态可用于研究碰撞反应中的量子共振，深化对化学反应微观本质的理解。然而，激发弱跃迁需在窄线宽条件下采用高激光功率，这一需求长期面临技术挑战。腔增强红外激发技术可实现千瓦量级等效功率，进而达成分子的连续激发。以分子束系统作为示范，我们实现了 CO、HD 等分子的高效率振动激发，其中对 CO (v=3)与 HD (v=2)的激发与制备效率能够达到 30%。气体分子痕量组分检测在大气化学、环境安全等领域极为重要，由于大气中痕量组分光谱信号弱，信号往往被其它组分干扰，对检测方法的灵敏度与选择性均提出极高要求。基于中红外腔增强技术，我们提出基于振动双光子吸收方法的分子传感器：双光子跃迁的无多普勒展宽特性赋予其优异的光谱选择性，高精细度腔则可显著提升检测灵敏度。通过对一系列碳-13 丰度各异的二氧化碳样品进行测量，验证了方法的定量检测能力；对含碳-14 样品的检测可以定量分析碳-14 同位素的丰度。由于化石来源样品不含碳-14，该研究为区分样品中碳的来源提供了技术支撑。

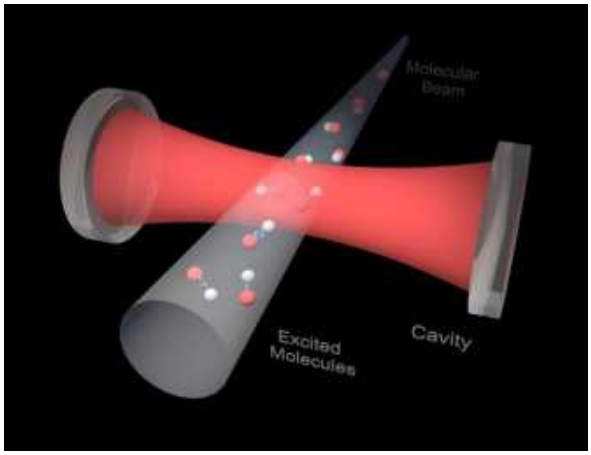


图1：分子束中的分子经过光腔，被光腔中的激光激发和制备到振动激发态

关键词：精密测量；分子光谱；冷碰撞动力学

参考文献：

[1] Q.-H., Liu, H. Zhang, L. Wen, Y. Xie, T. Yang*, C.-F. Cheng*, S.-M. Hu, X.-M. Yang, *J. Phys. Chem. Letts.* 2024, 15: 9926-9931.

[2] Z. Liu, Q.-H. Liu, C.-F. Cheng*, and S.-M. Hu, *Rev. Sci. Instrum.* 2024, 95: 115108.

[3] Y.-Z. Liu, M.-Y. Yu, Y.-D. Tan, J. Wang, C.-F. Cheng*, W. Jiang, and S.-M. Hu*, *Anal. Chem.* 2025, 97: 848-853.

甲烷在 118 nm 的光解动力学及其同位素效应

潘慧琳

南方科技大学理学院化学系，深圳，518055

*Email: panhl2019@sustech.edu.cn

甲烷是最小的有机分子，广泛存在于行星大气和星际空间中，其在真空紫外(VUV)波段的光解是宇宙中普遍且关键的光化学过程，对大气化学、星际科学等众多科学领域具有深远影响。深入探讨甲烷光解的动力学机理及其同位素效应，不仅在基础研究层面具有重要意义，更是解读天体中大气演化等科学问题的重要理论基础。对于甲烷光解已有大量研究，其解离通道及产物分支比仍有争议，解离机理尚待明确。

在该研究中，我们采用时间切片-离子速度成像技术研究了甲烷在 118 nm 处的光解离动力学，测量了不同产物通道 CH_3, CH_2 和 CH 的动量分布、各向异性参数分布[1]。结合已报道的氢原子产物的实验数据及理论计算结果，确定了甲烷在该波长下所有光解通道的分支比，并厘清了两体和三体解离产物，阐明了主要的解离机制。实验表明，$CH_2 + H_2$ 是最主要的解离通道，约占总产率的三分之二；$CH_3 + H$ 通道次之，占比约四分之一。此外，甲烷同位素 CHD_3 在相同波长下的光解离展现了显著的同位素效应。这项研究阐明了甲烷的 VUV 光解动力学，深化了我们对这一重要过程及其在相关学科中所起作用的理解。

关键词：离子速度成像；光解动力学

参考文献：

[1] Wang, P.; Lin, Q.; Xiao, C.; Yang, X.; Liu K.; Pan H. *J. Phys. Chem. A* 2024, 128: 5273.

气相金属团簇促进星际惰性小分子活化与氮–碳偶联机制研究

李子玉[1,*]，何圣贵[1,*]

[1] 中国科学院化学研究所，北京，100190
*Email: liziyu2010@iccas.ac.cn

氮气（N_2）、二氧化碳（CO_2）和甲烷（CH_4）是星际分子云、行星大气及彗星冰中等天体环境中广泛存在的惰性小分子，其活化与转化过程对理解宇宙中氮–碳循环及前生命分子的起源具有关键意义[1]。然而，N_2 因其极高的化学惰性，在低温、低密度的星际介质中难以发生有效反应[2]。近年来研究表明，广泛分布于星际空间中的金属离子及其聚集形成的金属团簇，为这类惰性分子在极端条件下的非热力学活化提供新路径[3]。本研究以气相金属团簇为模型体系，系统探索了金属团簇介导下 N_2 与含碳小分子（如 CH_4、CO_2）的耦合反应机制。我们首次提出“端氮触发”策略：N_2 在特定金属团簇上发生预解离吸附，形成金属–端氮（M–N_t）Lewis 酸碱对中心，该中心可高效活化甲烷的 C–H 键，实现 N_2 与 CH_4 的直接偶联，生成含 C–N 键的产物。该机制为行星大气中金属离子参与的氮–碳成键过程提供了微观模型[4]。进一步地，我们发现了 N_2 与 CO_2 在双核金属团簇上耦合生成 NCN 结构单元的新路径。解离吸附的 N_2 形成桥式氮物种（M–N_b–M），该活性中心可捕获 CO_2 并构建 C–N 键，反应过程中产生的端氮自由基进一步促进了 NCN 类物质的形成。这一路径为星际介质中含氮碳化合物（如氰腈自由基 NCN）的起源提供了新的化学来源[5]。本工作表明气相金属团簇可作为星际尘埃活性中心的微观模型，揭示星际空间中惰性小分子活化与偶联的反应路径。相关机制的阐明不仅深化了对星际氮–碳元素循环的理解，也为金属参与的前生化合成路径提供了实验依据与理论模型，从而对揭示宇宙化学演化及生命前分子的起源具有重要启示。

关键词：天体化学；N_2活化；C–N偶联；金属团簇

参考文献：

[1] Öberg, K. I. *Chem. Rev.* 2016, 116: 9631–9663.

[2] Millar, T. J.; Walsh, C.; Field, T. A. *Chem. Rev.* 2017, 117: 1765–1795.

[3] Thripati, S.; Gautam, R.; Ramabhadran, R. O. *ACS Earth Space Chem.* 2023, 7: 77–91.

[4] Mou, L.-H.; Li, Y.; Wei, G.-P.; Li, Z.-Y.; Liu, Q.-Y.; Chen, H.; He, S.-G. *Chem. Sci.*, 2022,13: 9366-9372

[5] Liu, X.-X.; Li, Z.-Y.; Zhao, X.-G.; Liu, Q.-Y.; Zhao, Z.-P.; He, S.-G. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025: e19854.

硫化氢不同波段下的光解动力学机制

胡茜茜

南京大学匡亚明学院，南京 210023
*Email: xxhu@nju.edu.cn

光解动力学研究在模拟大气化学、燃烧化学和星际化学中的许多重要过程中都起着关键作用，也是理论与实验研究紧密结合并相互促进的典范。然而，许多重要小分子在真空紫外波段的态-态光解动力学研究并不完善，其微观机制仍不够明确。硫化氢（H_2S）作为星际介质中含量最丰富的含硫分子之一，其紫外光解离过程会生成 SH 与 H_2 等碎片，这些反应在星际硫化学和硫同位素分馏中起着关键作用。尽管 H_2S 的高激发态光解动力学性质已通过实验得到广泛的研究，但高精度的理论研究受制于多态透热化和非绝热量子动力学的难度而十分有限。我们从第一性原理出发，结合机器学习方法，构建了 H_2S 体系的多个 A' 和 A"电子态的透热势能矩阵，结合量子波包和轨线面跳跃等动力学方法，获得了 H_2S 及其同位素取代物的态-态光解动力学性质。与实验团队紧密合作，我们取得了多项重要发现:1.实验发现了 H_2S 在特定短波长光激发下生成高振动激发的 H_2 产物的新通道，理论基于高激发态势能面成功解释了其振动态集中分布的原因；2.定量揭示了 H_2S 分子 A 带光解的微观动力学特性，以及同位素取代对光解动力学的影响，与实验精准吻合；3 采用神经网络透热化方案，构建了 H_2S 最低四个 ^{1}A'态的透热势能矩阵。进一步计算了 143.15nm 附近的吸收光谱，并成功复现了 H + SH(X/A)产物的实验内能分布。发现 H_2S 体系由于 2^1A'势能面存在一个由两个交叉缝所围成的势阱，使得 SH(X/A)产物呈现出明显的取向依赖解离机制，显著不同于 H_2O 分子体系的光解特性。以上工作通过高精度势能面构建与量子态分辨的动力学研究，能够获得与高分辨实验精准对比的吸收光谱与产物量子态分布等，揭示了不同势能面特征（如避免交叉、锥形交叉等）对动力学的关键影响，有助于阐明硫化氢不同波段下的光解动力学微观机制。

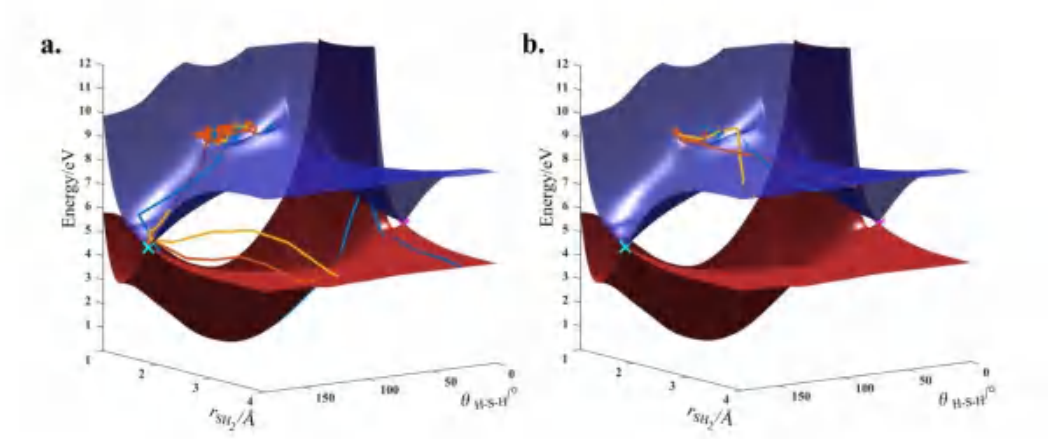


图1：H_2S体系$1^1A'$ 与$2^1A'$ 电子态的绝热势能面以及生成(a)SH(X)与(b)SH(A)产物的典型轨迹

关键词：硫化氢；激发态；光解动力学；透热势能矩阵；吸收光谱

AI 和物理双驱动的复杂反应网络构建

朱通 [1,2*]

[1] 华东师范大学，上海市中山北路 3663 号，200062
[2] 上海创智学院，上海市华发路 699 号，200231
*Email: xxx@xxx

摘要正文：地球生命的起源仍然是科学领域的一大未解之谜。尽管在前生物条件下进行的许多自下而上的实验为生命的自发化学起源提供了宝贵的见解，但对于其中复杂反应过程的理解仍存在显著的空白。在本研究中，我们提出了一种新颖的方法，使用以纯粹笛卡尔坐标形式化的旋转平移不变势（RTIP）来促进化学反应的自动化模拟。通过采用 RTIP 路径采样探索原始分子的反应性，我们识别出几种低能量的反应机制，如双氢转移氢化反应以及 HCOOH 催化的水合作用和氨基化作用。这些工作构建了一个全面的反应网络，展示了甘氨酸、丝氨酸和丙氨酸的合成路径。进一步的热力学分析突显了甲烯亚胺在氨基酸合成中的关键前体角色，因为与传统认知的氢氰酸相比，甲烯亚胺在偶联反应中的反应性更为有利。我们的研究表明，RTIP 方法结合分而治之的策略为复杂反应过程的模拟提供了新的视角，并为推进复杂体系化学反应机理研究提供了有价值的新工具。

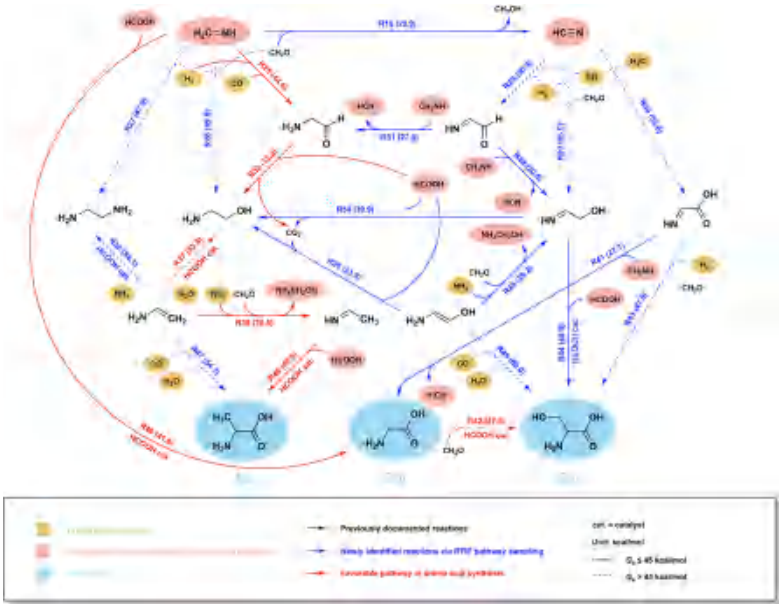


图1：氨基酸合成路径的自动化发现

关键词：反应网络；机器学习；反应路径

参考文献：

[1] Li*, Zhu*, Zhang* *et. al*, ***JACS Au*** 2024, 4, 4757

[2] Wang*, Hu*, Sun*, Zhang*, Zhu* *et. al*, ***npj Comput. Mater.*** 2025, 11, 203.

[3] Zhang*, Zhu* *et. al*, ***JACS Au*** 2025, 5, 3892

基于同步辐射探索极端环境下多环芳香烃生长机制

赵龙*，李旺，杨玖重，许鸣皋

中国科学技术大学核科学技术学院，安徽省合肥市，230027
*Email: zhaolong@ustc.edu.cn

摘要正文：在众多星际介质中的分子中，多环芳香烃（Polycyclic Aromatic Hydrocarbons，PAHs）占据相当大的比重，它们以多种形式存在于星际介质中，包括烷基化、离子化、脱氢/氢化和质子化形态。前人工作推测多环芳香烃在星际中是普遍存在的[1]，占据星系中总碳量的 20%[2]。PAH 是星际中宇宙碳质尘埃的重要前驱体，与宇宙演化息息相关。同时，PAH 在冰介质中通过光解作用可以生成醇、酮、醚等有机分子，尤其是含氮 PAH，可能参与生命分子生成，或与早期生命演化相关[3]。PAH 的生长过程受反应动力学控制，由小分子的芳香烃（如苯）逐步生长至大分子多环芳香烃。目前在 TMC-1 环境中已经观测到多种 PAH 分子结构，而极端环境下 PAH 的生成机制仍欠缺认知。我们基于同步辐射光电离质谱技术开展 PAH 生成机制研究，并结合量化计算和动力学模拟，揭示极端环境下 PAH 的生成机制。研究发现共轭自由基复合机制能够快速生成 PAH，包括 C3、C5、C7 等自由基复合机制[4]。此外，我们发现 C4 加成（Hydrogen-Abstraction-Vinylacetylene-Addition，HAVA）机理在低温条件下能够实现 PAHs 的高效合成[5]，以及发现并发展 fulvenallenyl addition cyclization aromatization（FACA）低温加成机理[6]。这些 PAH 前驱体自由基均被证实在星际环境中广泛存在，对于揭示星际极端环境，尤其是对低温环境下 PAH 的气相生长过程具有重要意义。同时，FACA 反应机理是继六元碳环成长机制之后，将五元和七元碳环结构引入到 PAH 生长路径中的又一重要机理，它对于理解鞍型多环芳烃乃至纳米碳的生成与生长起到了重要指导。

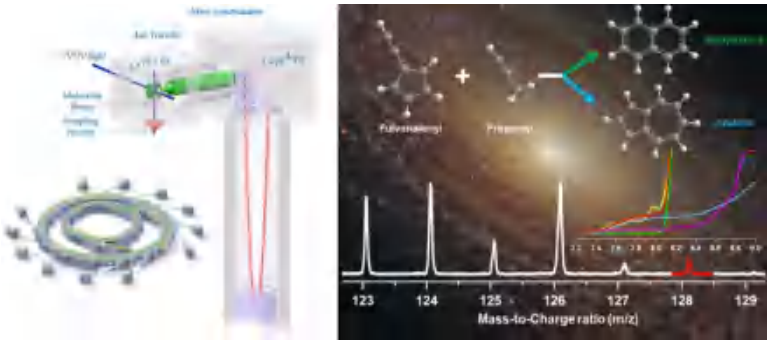


图1：基于同步辐射光电离质谱技术原位探测反应中间体和产物芳烃并进行定性定量分析

关键词：同步辐射光电离质谱；星际极端环境；多环芳香烃；自由基；反应动力学

参考文献：

[1] Ricks, A. M.; Douberly, G. E.; Duncan, M. A., *Astrophys. J.* **2009,** *702* (1, Pt. 1), 301-306.

[2] A. G. G. M. Tielens; C. Kerckhoven; E. Peeters, S. H., *Proc. IAU Symp.* **2000,** *197*, 349-362.

[3] Micelotta, E.; Jones, A.; Tielens, A., *Astron. Astrophys.* **2010,** *510*, A36.

[4] L. Zhao, W. Lu, M. Ahmed, M. V. Zagidullin, V. N. Azyazov, A. N. Morozov, A. M. Mebel, R. I. Kaiser, ***Sci. Adv.* 2021,** 7, eabf0360.

[5] L. Zhao, R.I. Kaiser, B. Xu, U. Ablikim, M. Ahmed, M.M. Evseev, E.K. Bashkirov, V.N. Azyazov, A.M. Mebel, ***Nat. Astron.* 2018**, 2, 973.

[6] W. Li, M. Wu, . Wang, J. Huang, J. Yang, F. Zhang, T. Yang and L. Zhao, ***Chem. Sci.* 2025**, 16, 7864.

环状星际分子候选者的实验室转动光谱研究

冯刚

[1] 重庆大学，重庆市高新区大学城南路 55 号，401331
*Email: fengg@cqu.edu.cn

星际有机分子的探测对于探索生命的空间起源、揭示复杂有机物的化学演化机理和空间物理化学环境具有重要意义。射电观测是探测星际分子的主要手段。然而，射电观测数据中包含星云中所有原子、分子的光谱信号，非常复杂，通常需要和实验室光谱数据进行比对才能确认星际分子的种类。在这些光谱中，转动光谱与分子结构密切相关，是分子的指纹图谱。目前已探测到的星际分子中，绝大多数分子是根据分子转动特征谱线得以确认。我们利用自制的高分辨傅里叶变换微波谱装置，精确测量了一些含S、-NH_2、-CN、-NCS等官能团的潜在星际分子的转动光谱，获得了准确的光谱参数、特征谱线频率及强度[1]。本工作将介绍我们近期针对环状星际分子候选者（环丙基乙腈、氢化萘和氰基噻吩）的转动光谱研究结果[2-4]。

关键词：转动光谱；星际分子；分子谱线

参考文献：

[1] Y. G. Xu, J. Q. Zhang, W. Q. Li, J. Li, G. Feng, *ACS Earth Space Chem.* **2021**, **5**, 33-39.

[2] Y. T. Li, F. Shen, Y. Feng, W. Q. Lv, H. Y. Huang, J. X. Huang, G. Feng, *J. Chem. Phys.* **2025**, **162**, 134301.

[3] Y. T. Li, G. Feng, *et al.*, Submitted.

[4] Z. Wang, G. Feng, *et al.*, to be published.

星际尘埃冰幔表面物理化学过程以及红外光谱的实验研究

何佼

深圳技术大学工程物理学院，广东省深圳市坪山区兰田路 3002 号
*Email: hejiao@sztu.edu.cn

摘要正文：

星际尘埃表面的冰幔是宇宙中分子生成的重要场所。在星际分子云的低温真空环境中，原子和简单分子吸附于尘埃表面，通过扩散引发化学反应，形成以水、二氧化碳、一氧化碳、氨、甲醇、甲醛和甲烷为主的冰幔。对星际冰幔里分子的探测很大程度上依赖于实验室对模拟星际冰的中红外光谱的测量。为了量化尘埃表面化学过程，必须对尘埃以及冰幔表面的吸附、扩散、脱附过程进行定量的实验测量。目前这两方面的实验数据仍然欠缺，限制了星际冰相分子的探测，导致星际化学模型计算不准确。本报告将介绍本人在星际冰以及尘埃表面的物理化学过程，以及冰的光谱测量和冰结构研究方面的几项实验工作。报告还将介绍深圳技术大学正在搭建的星际冰实验研究装置的主要功能。

N_2 在 Ru(0001)表面非弹性散射的动力学研究

赵梓博[1]，文海洋[2]，江雯[1]，张思远[1]，姜洪岩[1,*]

[1]南方科技大学化学系，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055
*Email: jianghy@sustech.edu.cn

气体分子在星际尘埃表面的反应在星际化学中占有重要地位，因此气体分子在表面的散射、吸附与解离等过程受到了广泛的研究关注。利用最近完成搭建的多分子束——表面散射实验装置，本文详细地研究了 N_2 在 Ru 表面散射的能量分布与转动分布对入射能量，入射角度以及表面温度的依赖关系，同时本文也讨论了散射过程中 N_2 振动态非绝热激发的可能。

关键词：N_2散射；N_2吸附；表面散射

参考文献：

[1] L. Diekhöner, L. Hornekær, H. Mortensen, et al. *J. Chem. Phys.* 2002, 117: 5012.

[2] M. J. Murphy; J. F. Skelly; A. Hodgson; B. Hammer, et al. *J. Chem. Phys.* 1999, 110: 6954.

恒星形成区气体加热机制研究进展

汤新弟

中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐，830011
Email: tangxindi@xao.ac.cn

研究分子云加热和冷却机制，是分子云热平衡研究中的重要课题。恒星形成区中的气体处在一个十分复杂的环境和状态中，气体的加热受到恒星形成过程中多种物理过程的影响。详细地研究恒星形成区气体加热机制可以帮助我们更好地了解恒星形成过程对周围分子云物理化学环境的影响。本报告将介绍恒星形成区气体加热研究的最新进展即使用 APEX 12 米、JCMT 15 米、IRAM 30 米以及 ALMA 望远镜对银河系和大麦哲伦星系中恒星形成区开展的系列观测研究工作。

关键词：星际介质；分子云；恒星形成；分子谱线

参考文献：

[1] Zhao, X., Tang, X. D., Henkel, C., et al. 2024, A&A, 687, 207

[2] Tang, X. D., Henkel, C., Menten, K. M., et al. 2021, A&A, 655, 12

[3] Li, D. L, Tang, X. D, Henkel, C., et al. 2020, ApJ, 901, 62

[4] Tang, X. D., Henkel, C., Wyrowski, F., et al. 2018, A&A, 611, 6

[5] Tang, X. D., Henkel, C., Menten, K. M., et al. 2018, A&A, 609, 16

[6] Tang, X. D., Henkel, C., Chen, C.-H. R., et al. 2017, A&A, 600, 16

[7] Tang, X. D., Henkel, C., Menten, K. M., et al. 2017, A&A, 598, 30

Systematic measurements on Galactic Interstellar isotope abundance Ratios

Jiangshui Zhang [1], Christian Henkel [2], Yaoting Yan [2], Zhiwei Liu [1], Wei Liu [1], Hongzhi Yu [3], Youxin Wang [2], Yipeng Zou [4,5], Xueying Wang [1], Dingyuan Wei [1]

[1] Department of Astronomy, GuangZhou University, GuangZhou, 510006, China
[2] Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, D-53121 Bonn, Germany
[3] Ural Federal University, 19 Mira Street, 620002 Ekaterinburg, Russia
[4] Department of Physics and Astronomy, University of Bologna, Via Gobetti 93/2, 40129 Bologna, Italy
[5] INAF, Astrophysics and Space Science Observatory Bologna, Via Gobetti 93/3, 40129 Bologna, Italy

*Email: jszhang@gzhu.edu.cn

Abstract: Stellar nucleosynthesis converts hydrogen into heavier elements and subsequent stellar ejections change the chemical composition of the interstellar medium (ISM), driving the so-called chemical evolution of galaxies (GCE). Isotopic abundance ratios in the ISM therefore are believed to be good tracers for the nucleosynthesis, the ejecta by different stars, and the GCE. In the framework of an inside-out formation scenario for our Galaxy, radial gradients of isotope ratio $^{n1}X/^{n2}X$ in the Galactic disk could be expected, due to their (^{n1}X, ^{n2}X) different nucleosynthetic paths with different time scale. However, few systematic research has been done.

Thus we have been performing systematic measurements on Galactic interstellar isotope ratios (from 2014), using IRAM 30m, ARO 12m, SMT 10m, Delingha 13.7m, Effelsberg 100m and TMRT 65m etc., focusing the most abundant elements, including $^{12}C/^{13}C$, $^{14}N/^{15}N$, $^{18}O/^{17}O$ and $^{32}S/^{34}S$. The more precise measured isotope ratios and their gradients, the tighter the constraints we can impose on the synthesis of CNOS isotopes and the GCE of our galaxy. The advantages of our survey on isotope abundance ratios include large sample, different molecular tracers, multi-transition lines. Here we present our measured results to date (Zhang et al. 2015, 2020; Yu et al. 2020; Yan et al. 2019, 2023; Chen et al. 2021, 2024; Zou et al. 2023, 2025).

Keywords：Systematic; Isotopic abundance ratio; inside-out formation; Galaxy chemical evolution

References：

[1] Zhang, J. S., Sun, L. L., Riquelme, D., et al. 2015, ApJS, 219, 28
[2] Zhang, J. S., Liu, W., Yan, Y. T., et al. 2020, ApJS, 249, 6
[3] Yan, Y. T., Zhang, J. S., Henkel, C., et al. 2019, ApJ, 877, 154
[4] Yan, Y. T., Henkel, C., Kobayashi, C., et al. 2023, A&A, 670, A98
[5] Yu, H. Z., Zhang, J. S., Henkel, C., et al. 2020, ApJ, 899, 145
[6] Chen, J. L., Zhang, J. S., Henkel, C., et al. 2021, ApJS, 257, 39
[7] Chen, J. L., Zhang, J. S., Henkel, C., et al. 2024, ApJ, 971, 164
[8] Zou, Y. P., Zhang, J. S., Henkel, C., et al. 2023, ApJS, 268, 56
[9] Zou, Y. P., Zhang, J. S., Wei, D. Y., et al. 2025, submitted to ApJS

星际介质中从原子氢到分子氢的演化

汤宁宇[1*]，李荫[2]，罗干[3]，夏季风[4]

[1]安徽师范大学，安徽省芜湖市，241002
[2]清华大学，北京，10084
[2]Institut de Radioastronomie Millimetrique, 300 rue de la Piscine, 38400, Saint-Martin d'Hères, France
[4]中国科学院国家天文台，北京，100101
*Email: nytang@ahnu.edu.cn

摘要正文：

从原子氢到分子氢的演化是星际介质以及星系演化的关键。研究银河系不同环境中星际气体从原子氢到分子氢的演化能够提供气体演化时标等基本参数，助力构建星系观测和数值模拟的桥梁。在本报告中，我们将基于射电观测结果探讨弥散区域中国不同相态的原子氢子对于分子氢形成的贡献，以及汇报简单化合物分子（CO、OH、CH 等）的观测所揭示的原子-分子演化的条件。

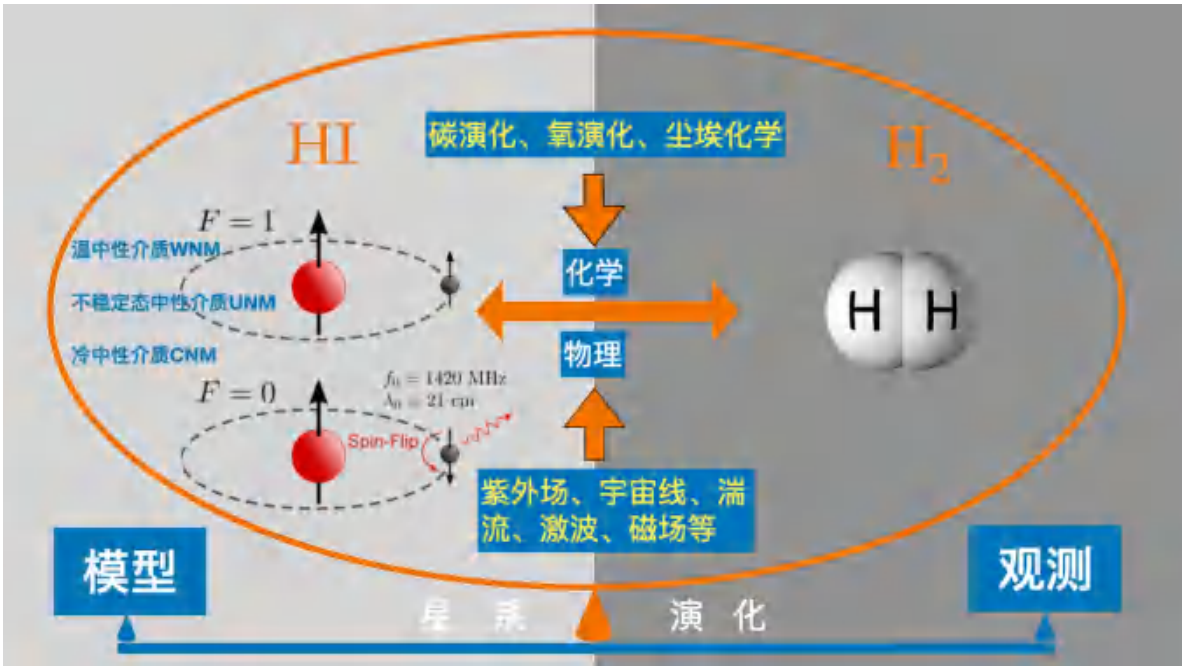


图1：原子–分子转变与星系演化之间关系的示意图。

关键词：星际介质；原子–分子转变；星系演化

参考文献：

[1] McClure-Griffiths, N., Stanimirovic, S. & Rybarczyk, D. ARA&A, 2023, 61, 19

FAMAE——中长波红外空间巡天计划

刘超 [1]

[1] 中国科学院国家天文台，北京市朝阳区大屯路甲 20 号，100101
*Email: liuchao@nao.cas.cn

摘要正文：中长波红外是天文学的重要领域之一。对于气体、尘埃和星际分子为代表的许多天体组分来说，这一电磁窗口具有独特的观测能力。在这个领域的国际发展前潮已落后浪未起的背景下，抓住时机建设我国自己的中长波红外望远镜，实现这一领域零的突破，将具有重大的战略意义。基于此，我们提出FAr-/Medium-infrared All-sky Explorer (FAMAE）项目建议。本项目计划开展我国首个一米级中长波红外巡天望远镜，主要科学目标包括太阳系外生命普查和第九大行星及柯伊伯带天体搜寻等。该项目将采用扫描巡天模式获得全天亮于1mJy（@100um）目标的低分辨率光谱，波长范围覆盖5-210um左右。该项目预期在天体化学、星际介质、恒星形成、太阳系天体等领域取得重要观测数据，推动我国在红外天文观测研究方面取得突破。

关键词：空间天文；红外天文

Infall and Outflow Activities in Star formation

Gang Wu[1,2*], Christian Henkel[2], Dong-dong Zhou[1]

[1]Xinjiang Astronomical Observatory, CAS, 150, Science 1-Street Urumqi, Xinjiang 830011, China
[2]Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, 53121 Bonn, Germany
*Email: wug@xao.ac.cn

Abstract: The accretion and ejection of material are the two fundamental processes driving star formation. However, neither of these processes is yet well understood, as we still have limited evidence regarding the origin of tracers used to monitor them, as well as our limited knowledge of the accretion/ejection interface and their physical connection. Observing infall is crucial for comprehending the accretion process in star formation. Continuous efforts have been made to improve our capacity for detecting infall motions, aiming to achieve a comprehensive understanding of these motions in star-forming regions across a wider range of evolutionary stages and spatial scales. In this talk, we emphasize our efforts on a promising infall tracer, i.e. ammonia hyperfine intensity anomalies, which could serve as more effective infall tracers for relatively cold gas and large-scale motions. For generally more evolved objects, the launch and collimation mechanisms of jets remain subject to debate and the details of the interactions between jets and outflows are still unclear. One of the main reasons has been the inadequate angular resolution of current facilities needed to zoom into the launching and collimation zone. Therefore, we seek to utilize the so far highest resolution VLBI observations to study these critical aspects in the close vicinity of the protostars, G26.

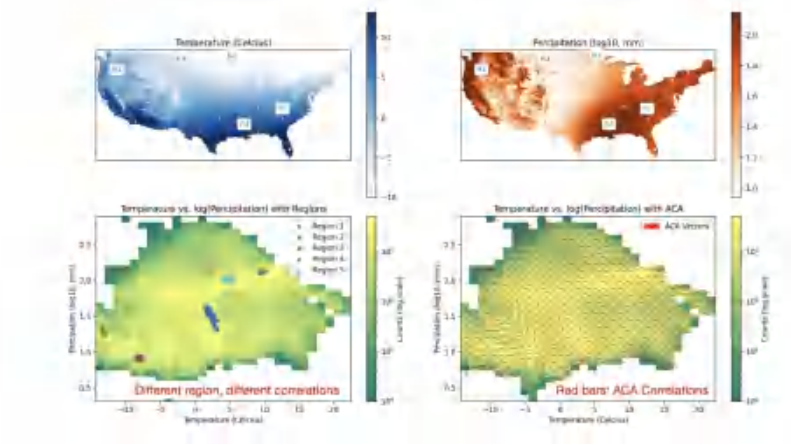
Keywords: Star formation, infall, outflow

物理天文学中的计算驱动知识发现

李广兴

[1] 云南大学 云南昆明呈贡 650500
*Email: ligx.ngc7293@gmail.com

摘要正文：在当代科学领域中，对大规模数据集内复杂模式的有效理解构成了一项核心挑战。人工智能（AI），特别是机器学习（ML）的迅猛发展，已使其成为模式分析的主导力量。然而，其广泛应用往往受到若干重大实践限制的制约：对海量训练数据的需求、模型训练所需的高强度投入，以及至关重要的、所得模型的不透明“黑箱”特性。我们提出（1）利用 Adjacent Correlation Analysis (https://adjacent-correlation-analysis.readthedocs.io/en/latest/) 研究天文数据中隐藏的相关性。（2）利用 Constrained Diffusion (https://github.com/gxli/Constrained-Diffusion-Decomposition) 和 Volume Density Mapper (https://github.com/gxli/volume-density-mapper/) 研究分子云的多尺度结构和 3D 结构。



相邻相关性分析是一种方法，它允许用户以更直观的方式可视化两幅图像之间的局部相关性。通过使用二维直方图比较两幅图像，会丢失空间信息。相邻相关性分析则允许评估相空间中代表局部诱导相关性的向量。

关键词：计算物理，多尺度过程，数据可视化，知识提取

参考文献：

[1] G.X. Li, Revealing hidden correlations from complex spatial distributions: Adjacent Correlation Analysis, arXiv preprint arXiv:2506.05759 (2025).

[2] G.X. Li, Mapping correlations and coherence: adjacency-based approach to data visualization and regularity discovery, arXiv preprint arXiv:2506.05758 (2025).

[3] G.X. Li, M. Zhao, Volume Density Mapper: 3D Density Reconstruction Algorithm for Molecular Clouds, arXiv preprint arXiv:2509.17369 (2025).

[4] G.X. Li, Tidally-Controlled Fragmentation around Black Holes, Massive Clumps, Protostars, and the Galactic Center, arXiv preprint arXiv:2509.18495 (2025).

A multi-dimensional approach to modelling photodissociation regions

Thomas G. Bisbas[1*], **Zhengping Zhu(朱正平)**[1], **Xuejian Jiang (蒋雪健)**[1], **Xuefei Tang (唐雪飞)**[1], **Tianwei Zhang (张天惟)**[1], **Gaoyuan Zhang (张高原)**[1]

[1]Research Center for Astronomical Computing, Zhejiang Lab, Hangzhou

*Email: tbisbas@zhejianglab.com

Photodissociation Regions (PDRs) are the sites where far-ultraviolet radiation from young stars dominates the chemistry and physics of the interstellar gas. They are the key interfaces for understanding star formation feedback. Modelling PDRs requires sophisticated tools capable of capturing their non-linear and complex chemistry. In this talk, I will present our group's multi-dimensional approach using the upgraded 3D-PDR code. I will demonstrate its application across different scales, from efficient 1D model grids to full 3D simulations. I will highlight our state-of-the-art, highly parallelized ray-tracing algorithm, RAYTHEIA, which enables high-resolution 3D astrochemical simulations of star-forming regions and cloud-cloud collisions. Finally, I will show how a grid of 1D PDR models combined with column-density distributions can decode the ISM environmental conditions with an application to the Orion A molecular cloud.

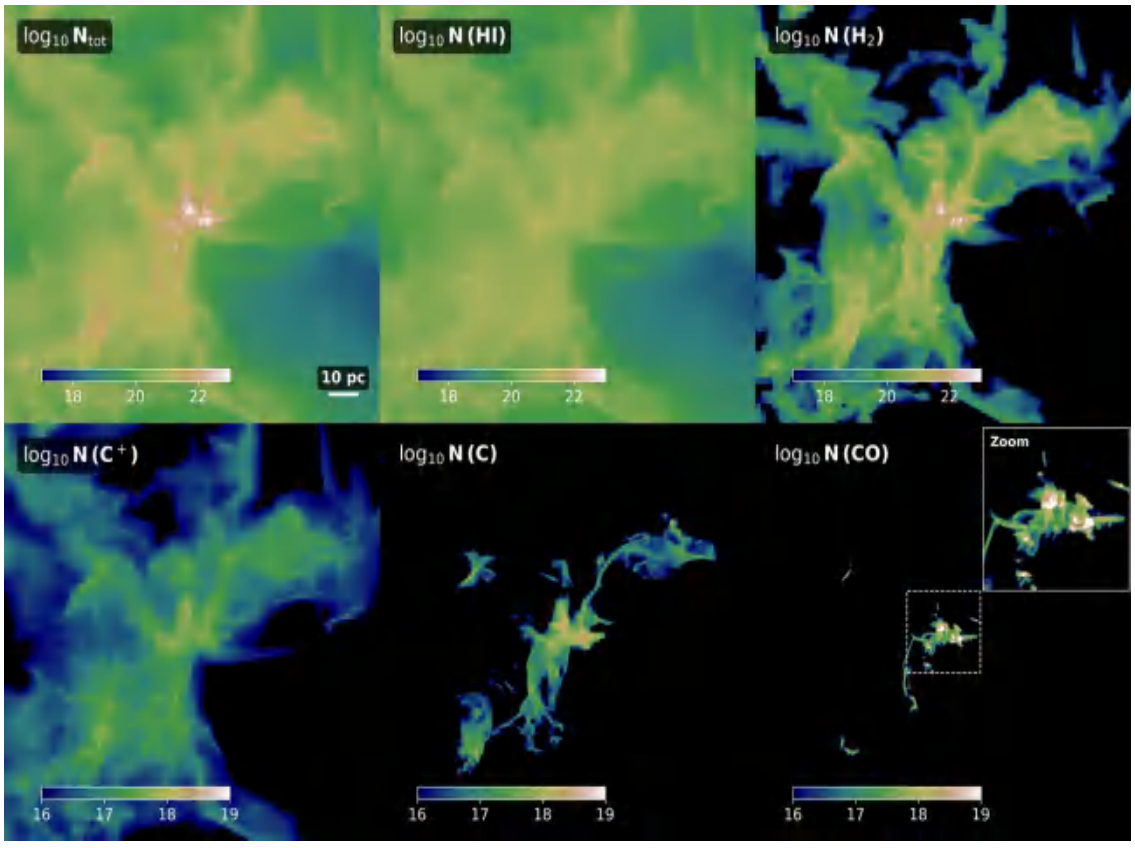


Fig. 1 3D-PDR model of a star-forming region showing column density maps of key species.

Keywords: **Photodissociation Regions, Radiative Transfer**

大小麦哲伦云中的星际分子

龚奘[1]

[1] 中国科学院紫金山天文台，江苏省南京市栖霞区元化路 10 号，210023
*Email: ygong@pmo.ac.cn

摘要正文：分子是揭示宇宙中物理和化学条件的重要探针。它们不仅记录恒星的诞生、演化与死亡过程，也为理解星系的化学演化乃至生命起源提供了关键线索。由于分子的形成与丰度强烈依赖于环境条件，不同金属丰度的星际环境会孕育出截然不同的分子组成。大小麦哲伦云是距离银河系约 50–60 kpc 的两个邻近贫金属星系，其金属丰度分别约为太阳的 0.5 倍和 0.2 倍，是研究低金属丰度星系化学特性的理想对象。我们在大麦哲伦云开展了目前覆盖频率最宽的分子谱线巡测，目前已探测到 20 余种分子，其中包括 CF^+的首次探测，并精确测定了 $^{34}S/^{33}S$ 同位素比值为银河系的一半。对小麦哲伦云的 ACA 谱线观测首次在小麦云中探测到 $C^{17}O$，并直接测得 $^{18}O/^{17}O$ 比值为 0.87±0.26，这一数值显著低于目前已知的银河系及其他星系分子云中的所有测量结果，表明该星系的金属增丰过程主要由低质量恒星主导。这些研究结果表明，大小麦哲伦云是研究贫金属环境下分子化学和星系演化的重要实验室，为连接本地星际化学与宇宙早期星系的化学演化提供了独特窗口。



图1：大麦哲伦云的谱线巡测

关键词：星际介质；星际分子；大小麦哲伦云；

参考文献：

[1] Gong, Y., Henkel, C., Menten, K. M., et al. et al. 2023, A&A 679, L6

[2] Gong, Y., Menten, K. M., Jacob, A. M., et al. 2024, A&A, 687, A29

[3] Gong, Y., Zhang, Z.-Y., Henkel, C., et al. 2025, ApJ, accepted, arXiv:2510.16343.

The ALMA-ATOMS/QUARKS survey: what we have learned about the formation and evolution of high-mass proto-clusters

刘铁 [1]

[1] 中国科学院上海天文台，南丹路 80 号，200030
*liutie@shao.ac.cn



图1：大质量恒星形成艺术想象图

关键词：恒星形成，分子云，天体化学

To statistically investigate the star formation process in the Galaxy, we initiated the ALMA-ATOMS/QUARKS survey programme at ALMA, which observed about 140 high-mass proto-clusters at band 3 and band 6 under an angular resolution of ~0.3-2 arcsec. I will talk about the current status of this survey and future plans. In particular, I will talk about astrochemistry studies using the survey data, including hot core chemistry and shock chemistry.

21 微米源中气态 CS 分子的物理和化学特性研究

邱建杰[1*]，张泳[2]

[1] 井冈山大学，江西省吉安市青原区，343009
[2] 中山大学，广东省珠海市唐家湾，519000
*Email: qiujianjie@jgsu.edu.cn

21 微米源天体是其光谱在 21 微米处存在辐射特征的一类天体。所有的 21 微米源都位于渐近巨星支（AGB）与行星状星云（PNe）中间的时标大约为 1000 年的过渡阶段。在该过渡阶段中，星周包层的化学物质组成、物理环境、以及结构形态都发生显著的变化。而 21 微米源又是其中极为罕见一类源，从 1989 年首次被发现到现在为止，只探测到 27 个 21 微米源。目前，人们对于 21 微米辐射是由于哪种尘埃物质产生的，依然没有定论。提出的候选体种类已超过 21 微米源的个数。而对于 21 微米辐射载体的证认，可以帮助我们完善天体化学网络和宇宙物质循环过程。因此，我们另辟蹊径，通过对 21 微米源的气态分子物理和化学特性的探究，间接推测和限制 21 微米辐射的尘埃载体[1]。

由于 21 微米源都存在 30 微米辐射，而 30 微米辐射普遍认为来自 MgS 尘埃分子，并且行星状星云中存在原因未知的硫元素丰度反常的现象。已有的观测表明气态 CS 分子的丰度在 PN 阶段无明显的下降趋势，与理论模型逾期相悖。已有 PPN 源的分子谱线巡天表明气态 CS 分子是含硫分子中最简单且丰度最高的分子，且 CS（5-4）是很好的 CS 分子的丰度探针。因此，我们对 7 个 21 微米源的 CS（5-4）进行观测，通过计算和分析发现：21 微米源的气态 CS 分子的丰度要低于其它源；在 AGB 阶段，CS 丰度与源光深的差异表明，气态 CS 丰度减小并非由星际紫外辐射的光致解离主导；在原行星状阶段，存在强 30 微米辐射的源，其气态 CS 分子丰度远小于非 21 微米辐射源，表明 CS 分子中的硫元素与 MgS 分子可能存在某种交换途径[2]。

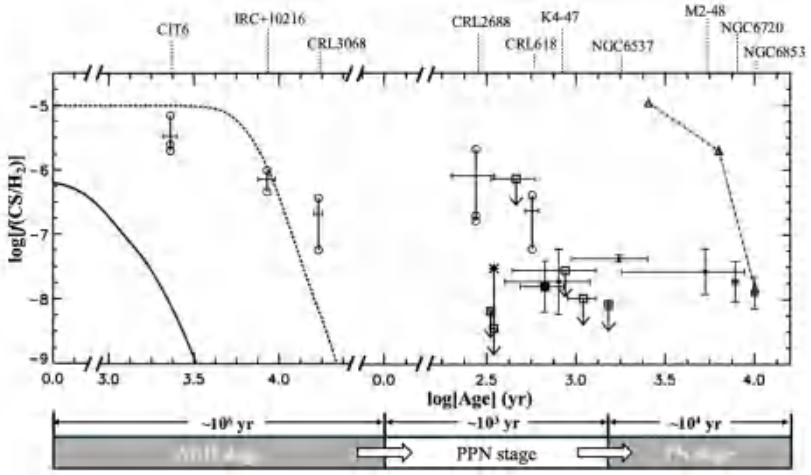


图 2： CS 的分丰度随恒星周包层动力学年龄的变化关系。实心方块和空心方块分别表示检测到和未检测到 CS 的 21 微米源。实心圆表示 PNe。由直线连接的空心圆表示 AGB 和 PPNe。实线和虚线分别代表气态星周化学模型 1 和 2 的计算结果。由点划线连接的空心三角形是星云的团块模型计算结果。垂直虚线标记了对比样本的动力学年龄和源名称。

关键词：分子气体；星际介质；星周包层；星周物质；前行星状星云

参考文献：

[1] Qiu J.J; Zhang, Y., Lu D.R.; Chang Z.X.; Zhang, J.S., Li X.H.; Tang, X.D.; Qiu, Y.S., Nakashima J., Jia L.W., AJ, 2025, 170:230.

[2] Qiu J.J., Zhang Y., Nakashima J., Zhang J.S., Li F., Lu D.R., Tang X.D., Yu X.L., AJ, 2024, 167:91.

EPIC: The Early Phase and Initial Conditions of Galactic massive star formation probed using molecular spectral lines

Ke Wang[1,*]

[1]Kavli Institute for Astronomy and Astrophysics (KIAA), Peking University, 5 Yiheyuan Road, Beijing 100871, China

*Email: kwang.astro@pku.edu.cn

Our understanding of massive star formation is strongly limited by the lack of observational constraints at the earliest evolutionary stages, in particular the initial conditions. Molecular spectral lines play a vital role in characterizing physical and chemical properties. We are carrying out systematic observations toward a pan-Milky Way sample of massive starless clumps, which are deemed, but have not yet started, to form massive stars. This presentation will highlight some of the first results from the EPIC program. More importantly, insights, discussion, and collaboration from chemists and the community are very welcome.

WST 揭示类星体驱动的复杂有机分子高速外流

蔡肇伟 [1]

[1] 中国科学院国家天文台，北京市朝阳区大屯路甲 20 号，100101
*Email: cwtsai@nao.cas.cn

热尘埃遮蔽星系（Hot DOGs）是在中高（z~2-5）发现的超高光度红外星系，主要能量由接近爱丁顿吸积极限，但被尘埃遮蔽的活动星系核提供，且其宿主星系具有剧烈的恒星形成活动。我们利用 JWST 的中红外光谱首次在红移 $z = 4.6$ 的极端类星体 W2246-0526 中分辨出 3.3 micron 芳香族与 3.4 micron 脂肪族的 C－H 吸收特征，整体蓝移约 -5250 km/s，表明有机尘埃被高速类星体外流带离星系核心，是目前已知最快的尘埃外流之一。结合离子气体速度（达 -13,400 km/s），我们确认了强辐射压驱动的多相外流结构。这些结果为早期宇宙的快速化学富集、碳尘形成及反馈过程提供了新的直接证据。

关键词：星际尘埃：碳质尘埃颗粒；红外光谱学：分子吸收特征；星系：活动核 — 外流与反馈机制

参考文献：

[2] Diaz-Santos, T., Assef, R.J., Blain, A.W., et al. 2018, Science, 362, 6418, 1034. doi:10.1126/science.aap7605

[3] Tsai, C.-W., Eisenhardt, P.R.M., Wu, J., et al. 2015, ApJ, 805, 2, 90. doi:10.1088/0004-637X/805/2/90

[4] Tsai, C.-W., Eisenhardt, P.R.M., Jun, H.D., et al. 2018, ApJ, 868, 1, 15. doi:10.3847/1538-4357/aae698

[5] Vayner, A., Diaz-Santos, T., Eisenhardt, P.R.M., et al.2025, ApJ, 989, 2, 230. doi:10.3847/1538-4357/addbdd

[1] Vayner, A., Diaz-Santos, T., Ferkinhoff, C.D., et al. 2025, submitted, doi:10.48550/arXiv.2510.09870

Surface Chemistry of Interstellar Carbon Chains

Gleb Fedoseev

Star systems similar to our Solar systems are formed from the interstellar clouds of gas in dust. Prior to the formation of a protostar the temperature in the densest region of such cloud drops to as low as 10 K. The depletion of atoms and simple species from the gas-phase onto the dust surface results in rich chemistry triggered by various reactions between the accreting species. These ice coated dust grains provide the initial chemical inventory for the formation of various celestial bodies during the later stages of star formation.

This work is motivated by the recent breakthroughs in the detection of unsaturated carbon chain species in TMC-1 by QUIJOTE line survey and the detection of saturated linear alkanes in the coma of the comet 67P/Churyumov-Gerasimenko by the ESA's Rosetta mission. We present the recent experimental results that provides the chemical link between these independent observations. We propose that under the conditions resembling those of molecular clouds, various unsaturated and semi-saturated carbon chains can participate in hydrogenation reactions on the surface of dust grains producing saturated linear alkanes as well as a number of other linear aliphatic organic compounds. The talk will be concluded with the discussions on the astrobiological implications of our results, and the connection of our results with the detection of long saturated aliphatic chains in samples returned from asteroid Ryugu by Hayabusa2 mission, and N-rich organic matter in samples from (101955) Bennu.

Interstellar Dust-Catalyzed Hydrogen Formation Enabled by Nuclear Quantum Effects

Xiaolong Yang[1], Lile Wang[2,3]*, Di Li[4], Shenzhen Xu[1]*

[1] School of Materials Science and Engineering, Peking University, Beijing 100871, China
[2]Kavli Institute for Astronomy and Astrophysics, Peking University, Beijing 100871, China
[3]Department of Astronomy, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China
[4]Department of Astronomy, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Molecular hydrogen (H_2) is one of the key chemical species that controls and shapes a wide spectrum of astrophysical processes ranging from galaxy evolution to planet formation. Although the catalyzation on dust grain surfaces is considered as the dominant formation channel of H_2 in the interstellar medium (ISM), which could nonetheless suffer from the Boltzmann factor suppression at low temperatures. Here we demonstrate that quantum tunneling can dominate the H_2 formation process, effectively resolving the long-standing efficiency problem across a wide range of temperatures. By employing the path integral method in hybrid Monte Carlo simulations to account for nuclear quantum effects (NQEs), we quantitatively identify that the tunneling of hydrogen atoms maintains relatively stable efficiencies even at temperatures below 50 K on both graphitic and silicate grain surfaces. The potential barriers associated with chemisorption/desorption and two-H association, rather than diffusion and hopping, are the dominant factors governing the actual reaction efficiency at low temperatures. These findings provide a solid physical foundation for molecule formation, which historically relied on ad-hoc formation rate multipliers to explain observed rates. The quantitative rates also offer new methodologies for observational constraints on H_2 formation and destruction, thereby enabling more accurate astrophysical models and interpretations on interstellar molecular materials.

Mode specificity in photodissociation of small molecules

Changjian Xie[1,*]

[1] Institute of Modern Physics, Northwest University, Xi'an, 710127
*Email: chjxie@nwu.edu.cn

An increased interest in nonadiabatic photodissociation of gas phase molecules has emerged in recent years owing to the involvement of a wide variety of novel issues, such as nonadiabatic tunneling, geometric phase effect, nonadiabatic resonances, and quantum interferences. Owing to the strong couplings in terms of conical intersections on the potential energy surfaces during the photodissociation of molecules, the Born-Oppenheimer approximation breaks down and the simulation of associated dynamics calls for the diabatic potential energy matrix (DPEM) of the system, which poses a great challenge to theoretical treatment. Interestingly, the mode specificity in the nonadiabatic photodissociation reaction can not only lead to different types of quantum interferences, but also be manifested by pronounced peaks or changes in absorption spectrum, product branching rations, and the translational energy distributions. In this report, the mode specificity in the photodissociation of phenol (PhOH), thioanisole ($PhSCH_3$), HONO, HPCO involving associated absorption spectra, product state distributions, and product branching ratios will be discussed.

Keywords： Photodissociation dynamics, mode specificity, conical intersection, diabatic potential energy matrix

References：

[1] Hou, S.; Wang, Z.; Xie, C. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2023, 25: 29556.

[2] Li, C.; Hou, S.; Wang, Z.; Xie, C. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2023, 25: 18797

[3] Xiong, F.; Hou, S.; Li, J.; Wang, Z.; Xie, C. *J. Chem. Phys.* 2024, 161: 014305

[4] Li, J.; Hou, S.; Xie, C. *J. Chem. Phys.* 2025, 162: 074308

[5] Hou, S.; Zhang, Z.; Xie, C. *J. Chem. Phys.* (to be submitted)

星际介质中多炔阴离子（$C_{2n}H^-$）的电子结构及光电离性质的理论研究

张凤[1,2*]，李东阳[1,2]，段赛[3]，李小虎[4]

[1] 中国科学技术大学未来技术学院，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
[2] 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
[3] 复旦大学化学系，上海市杨浦区淞沪路 2005 号，200438
[4] 中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐市新市区科学一街 150 号，830011
*Email: feng2011@ustc.edu.cn

近年来，随着探测与表征技术的持续进步，多种有机负离子已在星际介质中被陆续发现，其分布范围涵盖弥漫和致密星际云、恒星演化过程中的星周包层、土卫六大气等多类天体环境。这些发现表明，有机负离子可能在星际化学反应网络中扮演独特的物理与化学角色。目前，通过高分辨率振转光谱已确认的有机负离子主要为高不饱和的多炔阴离子（$C_{2n}H^-$）及其氰基取衍生物（$C_{2n-2}CN^-$），它们以碳-碳三键和碳-氮三键为特征结构。此类线性分子因其独特的光谱指纹而较易被识别，然而，其电子结构演化机理及在星际环境中相对高丰度的成因仍有待深入探讨。

本研究依托课题组发展的基于高斯递推算法的光脱附截面计算方法，以乙炔基负离子（$C_{2n}H^-$）至十碳五炔负离子（$C_{10}H^-$）为研究对象，系统开展了高精度量子化学计算。通过对几何结构与电子结构的系统分析，揭示了随碳链增长的演化规律，并获得了第一、第二电离能及相应的光脱附截面等关键物理量。基于此，我们进一步预测了这些负离子在典型星际辐射场中的光脱附速率，为评估其在星际介质中的稳定性和寿命提供了定量依据。未来我们将结合星际化学模拟与最新观测数据，解析多炔负离子形成与湮灭路径，为星际负离子搜寻与鉴定提供理论支撑。

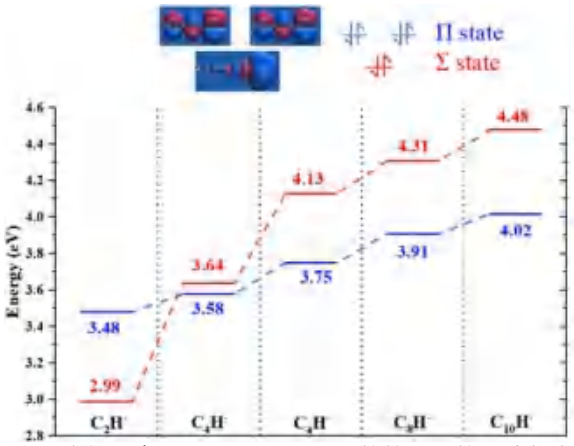


图1：多炔阴离子（$C_{2n}H^-$, n=1~5）的第一及第二绝热电离能,红色代表阴离子电离生成Σ对称态的自由基，蓝色代表阴离子电离生成Π对称态的自由基；计算方法为CCSD(T)/aug-cc-pVTZ//EOM-CCSD-OPT/aug-cc-pVTZ

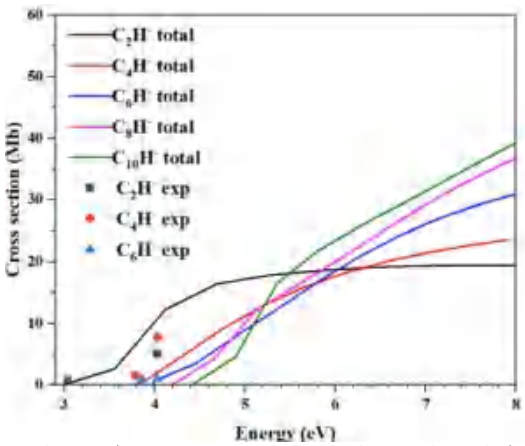


图2：多炔阴离子（$C_{2n}H^-$, n=1~5）由第一及第二电离态计算得到的总光脱附截面，其中Dyson轨道的计算方法为EOM-CCSD/aug-cc-pVTZ(+2s, +2p)；光脱附截面的求解采用课题组自研的Python程序包; Franck-Condon系数求解采用DynaVib程序

关键词：星际负离子；连炔烃负离子；真空紫外光电离；光电离（脱附）截面

参考文献：

[1] Millar, T. J., Walsh C., Field T. A., Chemical Reviews, 2017, 117(3): 1765-1795.
[2] Hrodmarsson, H. R.; van Dishoeck, E. F. Astronomy & Astrophysics, 2023, 675.
[3] Ruaud, M., Wakelam, V., & Hersant, F. MNRAS, 2016,459, 3756

利用二维光谱探测星系及活动星系核中的金属丰度分布

郝蕾 [1]

[1] 中国科学院上海天文台，南丹路 80 号，上海，200030
*Email: haol@shao.ac.cn

摘要正文：金属丰度是追溯星系化学演化历程的关键探针。本报告将首先简要回顾大样本光谱巡天在解析星系及活动星系核（AGN）整体金属丰度方面取得的成果。在此基础上，重点介绍依托积分视场光谱仪（IFS）获得的二维光谱在此领域的重要作用：通过同时获取空间与光谱信息，该技术能对目标天体进行空间分辨的普查，从而精细解析星系内部（如恒星形成区、AGN 窄线区）的物理结构，并直接测量其金属丰度梯度。这些观测揭示了星系盘面的丰度分布、并合事件中的物质混合以及 AGN 反馈对宿主星系化学演化的影响，为理解星系的质量组装历史与内部物理过程提供了关键观测依据。最后，报告将展望即将发射的中国空间站望远镜（CSST） 的积分场光谱仪（IFS）在宇宙化学演化研究方面的应用前景。

关键词：宇宙化学演化；星系；金属丰度；二维光谱；积分视场光谱仪；

基于 JWST 的褐矮星大气与尘埃特性研究

王舒 [1,*]

[1] 中国科学院国家天文台，北京市朝阳区大屯路甲 20 号，100101
*Email: shuwang@nao.cas.cn

褐矮星是质量介于最重气态巨行星与最轻恒星之间的亚恒星天体，具有复杂且动态的大气物理化学过程，是连接行星与恒星研究的桥梁。研究其大气结构、化学成分、分子吸收特征以及尘埃形成机制，不仅有助于深入理解低温大气的物理与化学性质，也对完善恒星演化模型和行星形成理论具有重要意义。

褐矮星的有效温度一般约 250–2400 K 之间，其大气中含有多种分子与尘埃成分，呈现出复杂的分子吸收特征；其化学组成和云层结构也会随着光谱型向晚型演化而发生系统性变化。这些特征使褐矮星成为研究大气化学平衡与非平衡过程以及云层物理的重要“天然实验室”。然而，由于其温度较低、辐射能量主要集中在红外波段，过去受限于观测设备灵敏度，对褐矮星的系统观测和样本积累仍然有限，相关研究也相对稀缺。

詹姆斯·韦布空间望远镜（JWST）以其卓越的红外观测能力，为研究褐矮星大气与尘埃特性提供了前所未有的契机。基于 JWST 的 NIRSpec 和 MIRI 观测，我们分析了 20 颗极冷褐矮星的大气光谱，发现其展现出显著的水（H_2O）、甲烷（CH_4）和氨（NH_3）的分子吸收特征，更冷的褐矮星还展现出一氧化碳（CO）和二氧化碳（CO_2）吸收线。此外，我们系统分析了超过 4 万条 JWST/NIRSpec PRISM 光谱，识别出 68 颗褐矮星候选体，其中 12 颗为新发现。本研究为探究褐矮星大气的分子特征与组成、尘埃性质与分布，以及其与星际介质和星周环境的相互作用，提供了宝贵的观测数据、丰富的新样本与分析结果。

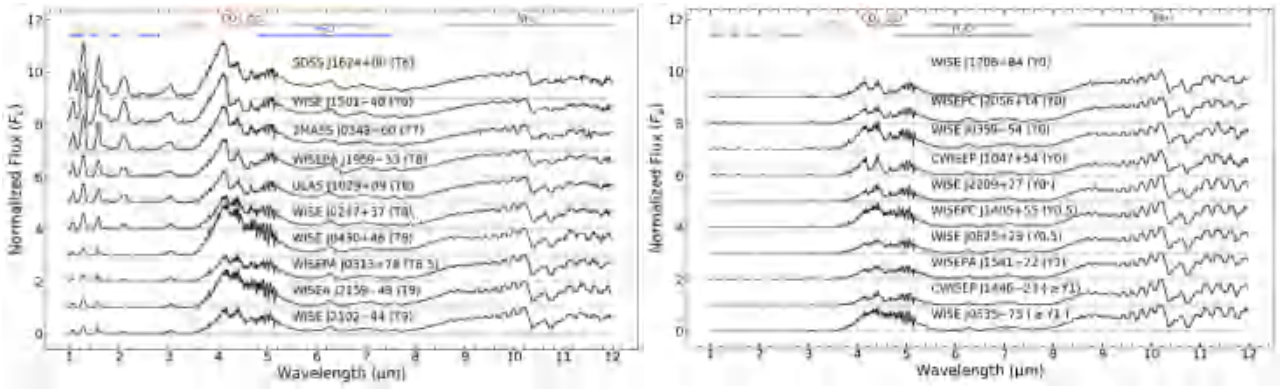


图1： 光谱类型从T6到>Y1的各种天体的JWST红外归一化光谱，呈现出丰富且随光谱型系统变化的分子吸收特征。

关键词：褐矮星；分子吸收；尘埃；JWST

参考文献：

[1] Tu, Z.; Wang, S.; Liu, J. *ApJ.* 2024, 976: 82

[2] Tu, Z.; Wang, S.; Chen X.; Liu, J. *ApJ.* 2025, 980:230

[3] Tu, Z.; Wang, S.; Chen X.; Liu, J. *ApJS.* 2025, revised

[4] Huang, H.; Wang, S.; Chen X.; Tu, Z.; Liu, J. *ApJ.* 2025, revised

基于 JWST/MIRI 红外光谱的尘埃矿物学和气体性质研究

刘尧
西南交通大学，成都市二环路北一段 111 号西南交通大学
Email: yliu@swjtu.edu.cn

摘要正文：类地行星很可能诞生于原行星盘的内盘区域。红外光谱观测是探究类地行星形成区中物化环境和尘埃气体性质的重要手段。相对于上一代红外光谱仪 Spitzer/IRS，JWST/MIRI 拥有更高的灵敏度和谱分辨率，能够获得不同年龄、不同主星质量端原行星盘的高信噪比光谱。最近，我们分析了一批原行星盘的 JWST/MIRI 数据，研究了类地行星形成区中尘埃的矿物学组成和大小以及气体性质。本报告将介绍这些进展。

ICE project：Chemistry in the Interstellar shocked Environment

Siyi Feng[1,*]

[1]Department of Astronomy, Xiamen University, Zengcuo'an West Road, Xiamen, 361005address
*Email: syfeng@xmu.edu.cn

Interstellar shocks provide natural laboratories for studying the interplay between dust and gas chemistry under extreme physical conditions. The ICE (Interstellar Chemistry in Shocked Environments) project aims to investigate how shocks driven by protostellar outflows and cloud–cloud collisions regulate chemical evolution and star-forming processing in the interstellar medium. By combining multi-scale observations with advanced chemical modeling, ICE seeks to understand the dust–gas interaction and molecular synthesis in dynamically active regions.

Observationally, the project uses high-sensitivity interferometric data from IRAM NOEMA, SMA, and ALMA, targeting key tracers of dust continuum and molecular line emission to probe both warm post-shock gas and the surrounding quiescent medium. On the theoretical side, ICE employs a three-phase chemical model, incorporating gas-phase, grain-surface, and ice-mantle reactions to quantify the roles of varying parameters, i.e., gas-to-dust ratios, ionization rates, element grain reservoir in shaping the observed molecular abundances.

Through this integrated approach by combining astrochemical modeling and observations, ICE aims to provide new insights into the dust evolution and chemical pathways in shocked star-forming regions.

Keywords：interstellar shocks, protostellar outflow, interstellar dust, cloud-cloud collision

References：

[1] Feng, S. et. al., *The Astrophysical Journal,* 2020, 896: 37.

[2] Feng, S. et. al., *The Astrophysical Journal Letters,* 2022, 933: L35.

银河系中心分子带极端物理化学环境下的恒星形成

吕行 [1,*]

[1] 中国科学院上海天文台，上海市徐汇区南丹路 80 号，200030
*Email: xinglu@shao.ac.cn

摘要正文：中央分子区（CMZ）通常指银河系中心 500 秒差距（pc）的区域，其蕴藏着大量稠密的分子气体[1]。由于银河系中心极端的物理和化学条件，CMZ 内的恒星形成表现出与太阳邻域截然不同的特征，例如恒星形成效率低约十倍，以及可能存在头重的初始质量函数[2,3]。为探究这些特殊恒星形成活动的起源，我们发起了名为 CONCERT 的观测计划，利用 ALMA、JVLA 和 JCMT 等观测设备开展了系统性观测研究，覆盖了从 100 pc 到 100 天文单位（AU）的尺度[4,5,6,7,8,9,10,11]。此外，在观测过程中我们还发现了一些未必与恒星形成直接相关、但独具研究价值的特征。以下重点介绍几项最新发现（大致按空间尺度从大到小排列）：i）通过多波段 ALMA 连续谱观测，绘制了一块分子云内 pc 尺度的尘埃温度与柱密度全景图谱；ii）发现了一类独特的 0.1 pc 尺度细长纤维结构，这类结构与银河系旋臂分子云中观测到的稠密气体纤维结构存在本质差异，可能是理解 CMZ 中广泛存在的激波探针和复杂有机分子的关键；iii）首次揭示了 CMZ 的 Brick 分子云内部小尺度（<0.01pc）的磁场分布，发现磁场可能调控气体的坍缩与碎裂过程；iv）利用 ALMA 最长基线的观测，将原恒星团解析至 100 天文单位（AU）尺度，发现原恒星之间动力学相互作用的迹象。

关键词：恒星形成；银河系中心；中心分子带

参考文献：

[1] Morris, M., & Serabyn, E. 1996, ARA&A, 34, 645.

[2] Henshaw, J. D., Barnes, A. T., Battersby, C., et al. 2023, in ASP Conf. Ser. 534, Protostars and Planets VII, ed. S. Inutsuka et al. (San Francisco, CA:ASP), 83.

[3] Mills, E. A. C. 2017, in BASH review series, arXiv:1705.05332.

[4] Lu, X., Cheng, Y., Ginsburg, A., et al. 2020, ApJL, 894, L14.

[5] Lu, X., Li, S., Ginsburg, A., et al. 2021, ApJ, 909, 177.

[6] Lu, X., Li, G.-X., Zhang, Q., & Lin, Y. 2022, NatAs, 6, 837.

[7] Lu, X., Liu, J., Pillai, T., et al. 2024, ApJ, 962, 39.

[8] Zhang, Z., Lu, X., Liu, T., et al. 2025, ApJ, 980, 44.

[9] Yang, K., Lu, X., Zhang, Y., et al. 2025, A&A, 694, A86.

[10] Zhang, S., Lu, X., Ginsburg, A., et al. 2025, ApJL, 982, L10.

[11] Xu, F., Lu, X., Wang, K., et al. 2025, A&A, 697, A164.

分子云天体化学模型的一些进展

葛继兴[1]

[1]中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐市新市区科学一街 150 号，830011
*Email: gejixing@xao.ac.cn

摘要正文：

随着射电观测技术的不断提高，在分子云内观测到的分子种类逐步提升，对天体化学模型给出了更加精确的限制。为了更好的解释分子的观测现象，分子云天体化学模型在快速的发展和完善之中。本报告将结合我们在射电观测和天体化学数值模拟方面的工作，探讨在星际尘埃相关化学、多环芳香烃（PAH）化学效应以及分子云三维物理和化学结构方面的一些新进展。

关键词：天体化学；分子云；射电观测；数值模拟

参考文献：

[1] Ge, J.; Mardones, D.; Liu, T.; Inostroza, N.; Peng, Y and He, J. *A&A(in press)*，2025

[2] Ge, J; Mardones, D.; Inostroza, N. and Peng, Y, *MNRAS*. 2023, 521, 2833-2844

[3] Ge, J. *RAA*. 2022, 22:01544

[4] Ge, J.; Mardones, D.; Inostroza, N. and Peng, Y. *MNRAS*.. 2020, 497: 3306.

[5] Ge, J; ; Mardones, D.; He, J; Rawlings, J.; Liu, S; Lee, J., Tetematsu, K.l Liu, T.; Zhu, L.; Chang, Q.; Inostroza, N. and Feng S., *ApJ*. 2020, 891:36

[6] Tang M; Ge, J.; Qin, S.; Liu, T.; Wu, Y.; Kim, K.; LIU, S.; Zhang, C.; He, J.; Ju B. and Fang X., ApJ, 2019, 887:243

[7] Ge, J; He, J. and Li A. *MNRAS*.. 2016, 460, L50-L54

[8] Ge, J; He, J. and Yan, H., *MNRAS*. 2016, 455, 3570-3587

带孔多相天体化学模型

常强 [1,*]

[1] 山东理工大学，山东淄博新村西路 266 号，255000
*Email: cahngqiang@sdut.edu.cn

两相模型和三相模型是目前天体化学建模所用的两类主要模型。这两类模型在解释观测到的星际分子方面各有优势，但是，目前并不清楚具体到到某个天文源，应该用哪类类模型。为了解决这个问题，我们最近发展了一个新的带孔多相模型。这个带孔多相在星际冰内部空隙多的条件下计算结果接近一个两相模型，而在空隙很少时候接近一个三相模型。带孔多相模型预测的星际分子丰度和观测结果吻合的比较好。我们的带孔多相模型结果结果显示，如果天文源的星际冰空隙多，应该采用两相模型化学建模，反之应该采用三相模型。

关键词：天体化学，星际分子，化学模型

参考文献：

[1] Ziwen Song, Qiang Chang, Qingkuan Meng and Xia Zhang, A&A, 2024, 691, A40

AI 赋能星际多环芳烃红外光谱的高通量计算

王昭[1,*]，麦兴鸿[1]，潘丽君[1]，G. Madsen[2]，J. Carrete[3]

[1]广西大学物理科学与工程技术学院，相对论天体物理实验室，南宁 530004，中国
[2]维也纳工业大学材料化学研究所，维也纳 1060，奥地利
[3]萨拉戈萨大学阿拉贡纳米科学与材料研究所，萨拉戈萨 50009，西班牙
*Email: zw@gxu.edu.cn

自 20 世纪 70 年代发现宇宙中特征性的红外发射带以来，多环芳烃（PAHs）被视为这些信号的主要载体，其芳香红外谱带的解析对理解星际介质演化至关重要。然而，传统量子化学计算受限于谐性近似、温度效应忽略及大分子体系计算成本高昂等问题，难以满足 JWST 时代对高精度光谱数据的需求。为此，本研究提出一种机器学习分子动力学（MLMD）方法，用于计算 PAHs 的非谐性红外吸收光谱[1]。该方法能够考虑温度效应，在计算成本显著降低的前提下达到与传统量子化学计算相当的精度，且计算复杂度随体系尺寸呈线性增长。我们运用 MLMD 方法对 NASA Ames 数据库中的 1,704 个 PAHs（最大含 216 个碳原子）进行了不同温度下的光谱计算，展现了该方法在大分子体系高通量光谱计算方面的优势。研究成果为构建大规模分子光谱数据集提供了有效工具，将显著增强天文红外光谱的数据驱动分析能力，并为 JWST 的后续观测研究提供重要技术支撑。

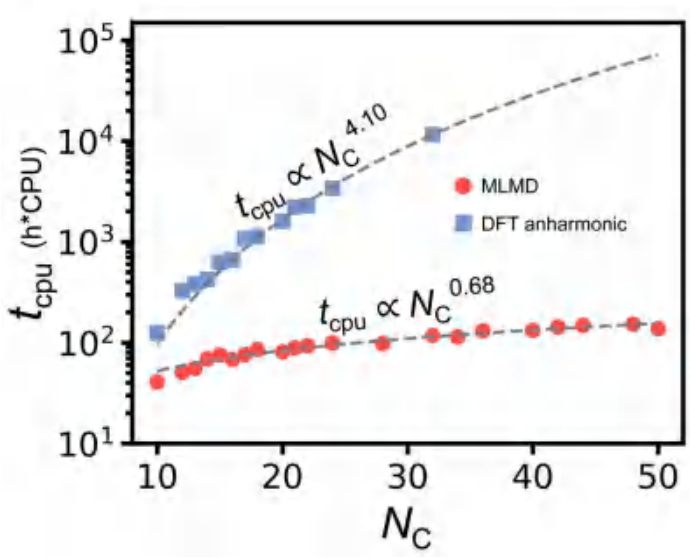


图1：基于机器学习分子动力学（红点）和传统量子化学计算（蓝点）方法，计算PAH分子非谐红外光谱所需的CPU时间随分子尺寸（碳原子数N_C）的变化关系。

关键词：芳香红外谱带；机器学习；非谐振动；神经网络；星际分子

参考文献：

[1] Mai X., Wang Z., Pan L., Schorghuber J, Kovacs P., Carrete J., Madsen G. *MNRAS* 2025, 541: 3073.

Photodissociation Dynamics of Silicon Dimers and Metal Compounds: Insights into Astrophysical and Chemical Processes of Molecules

Yujie Ma[1], Rulin Feng[1,2], Fangfang Li,[1] Dong Yan[1], Ang Xu[1], Ti Zhou[1], Jiaxing Liu[1], Igor Ying Zhang[1,2], Xin Xu,[1,2] Fengyan Wang[1,*]

[1]Department of Chemistry and Shanghai Key Laboratory of Molecular Catalysis and Innovative Materials, State Key Laboratory of Porous Materials for Separation and Conversion, Fudan University, Shanghai, 200438, China
[2]MOE Laboratory for Computational Physical Science, Shanghai Key Laboratory of Bioactive Small Molecules

*Email: fengyanwang@fudan.edu.cn

Silicon, one of the most abundant elements in the universe, along with silicon-bearing molecules, holds significant importance in astrophysics and astrochemistry. The detection of Si_2 molecules in interstellar gas remains elusive, posing a substantial challenge to our understanding of these systems, as Si_2 is the smallest unit involved in the nucleation process leading to the formation of silicon dust grains. We investigated the UV photodissociation dynamics of Si_2, aiming to deepen our understanding of its electronic structure and spectra. By integrating laser ablation molecular beam and time-sliced ion velocity imaging experiments with advanced theoretical calculations, we reveal the complex interactions between various excited electronic states and rapid dissociation pathways in Si_2 at different UV excitation energies.

In addition, metal compounds, particularly those involving magnesium, are abundant in space and significantly influence the formation and evolution of celestial bodies, making their study a cornerstone of astrochemistry. we employed laser-ablation molecular beam and time-sliced ion velocity imaging to investigate the UV photodissociation dynamics of diatomic metal compounds, including MgCl, MgH, and MgO. These techniques are critical for elucidating the state-to-state photodissociation dynamics, enabling the first exploration of bonding dissociation energies and potential energy surfaces of excited electronic states. Such research is essential for understanding the photochemical processes of metal-containing molecules in astrophysical environments, where these compounds play a pivotal role in the chemistry of stellar atmospheres, interstellar clouds, and planetary systems.

Keywords：Si_2 molecules, UV photodissociation dynamics, potential energy surface

Acknowledgement: The work was supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 22073019) and the Science and Technology Commission of Shanghai Municipality (No. 2024ZDSYS02)

References：

[1]Y. Ma, F. Li, D. Yan, A. Xu, T. Zhou, J. Liu, and F. Wang, Phys. Chem. Chem. Phys. **27**, 490 (2025).

[2]A. Xu, Y. Ma, D. Yan, F. Li, T. Zhou, J. Liu, and F. Wang, J. Phys. Chem. Lett. **16**, 3998 (2025).

[3]A. Xu, Y. Ma, D. Yan, F. Li, F. Song, T. Zhou, Z. Yuan, X. Liu, J. Liu, and F. Wang, J. Phys. Chem. Lett. **15**, 8721 (2024).

星际分子团簇的实验室光谱测量

李卫星[1,*]，张婷[1]，梁悦[1]，周鸣飞[1]

[1] 复旦大学化学系，上海市淞沪路 2005 号，200438
*Email: weixingli@fudan.edu.cn

摘要正文：腈类化合物是星际介质中重要的有机分子，其强质子受体性质和与水高效形成氢键的能力使其在宇宙化学和生命起源研究中备受关注。然而，腈类化合物的溶剂化效应及其微观机制尚不清楚。本研究利用自主研发的啁啾脉冲-傅里叶变换微波光谱技术系统测量腈类化合物-水团簇及其同位素取代物的高分辨转动光谱，并解析其几何结构和内部动力学。这些发现揭示了腈类化合物在低温、高真空环境下的微观溶剂化过程，为理解星际分子的化学演化提供了理论依据。

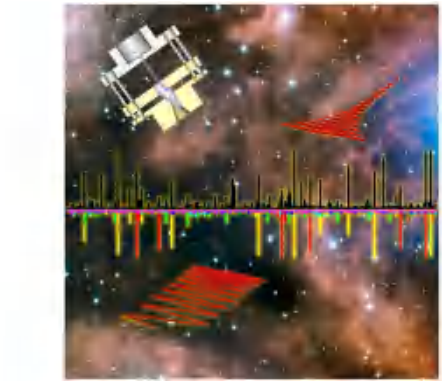


图1：星际分子微波光谱实验室测量示意图

关键词：微波光谱；星际分子；水团簇

参考文献：

[1] Li, W.; Pérez, C.; Steber, A. L.; Schnell, M.; Lv, D.; Wang, G.; Zeng, X.; Zhou, M. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 4119.

[2] Gao, Z.; Wang, G.; Agúndez, M.; Li, W.; Cernicharo, J.; Cabezas, C.; Zhou, M. *MNRAS*, 2025, 542, 1423.

过氧化物光电离截面的测量与光解动力学研究

王占东 [1*]

[1] 中国科学技术大学国家同步辐射实验室，安徽省合肥市，邮编：230026
*Email: zhdwang@ustc.edu.cn

过氧化物广泛存在于星际介质低温表面反应、大气挥发性有机化合物氧化以及燃料燃烧自氧化等过程中。精确测量其光电离截面并阐明其光解动力学，对实现过氧化物准确定量、验证星际化学模型预测的反应路径，以及理解二次有机气溶胶形成与燃料自燃机制具有重要意义。然而，受其化学不稳定性和分析手段的限制，过氧化物的光电离截面测定与光解离机制研究仍面临挑战，导致相关动力学模型存在较大不确定性。基于此，本研究在合肥光源原子与分子物理线站发展了喷雾气化-低压流动管-超声分子束取样-同步辐光电离质谱实验平台，实现了过氧化物的低温高效气化，并成功测量了 H_2O_2 的光电离截面[1]；同时，发展了一种温和环保的烷基过氧化物合成方法，获得了 13 种不同结构的烷基过氧化物标准品。通过上述实验平台，系统测量了其光电离截面。进一步，开发了基于化学滴定-同步辐射光电离质谱的过氧化物分析方法，结合测量的烷基过氧化物的光电离截面，实现了典型羰基过氧化物光电离截面的测量。通过实验测量和理论计算发现，烷基过氧化物和羰基过氧化物的光解离主要通过脱去 OOH 的路径发生，是过氧化物光解离的“指纹”反应通道（图 1），该“指纹”特征为复杂反应体系中过氧化物的精准鉴别与定量提供了新策略。本研究发展的过氧化物光电离截面测量方法与构建的光电离截面数据库，为发展过氧化物光电离截面计算和估算方法、以及星际化学模型和燃烧反应动力学模型中关键过氧化物反应路径的预测和验证奠定了实验基础。

关键词：过氧化物；光电离截面；星际化学；燃烧自氧化；同步辐射光电离质谱

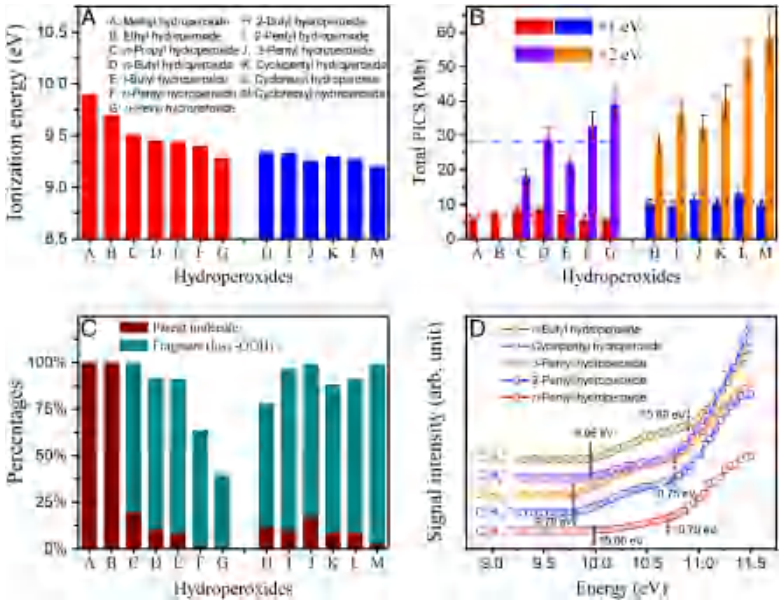


图 1 （a）烷基过氧化物的电离能，（b）总的光电离截面，（c）光解离通道占比，（d）OOH 脱去路径的出现势

参考文献：

[1] Dong, B., Hu, Z. H. Xu, Q., Liu, B. Z., Zhu, Q. B., Guan, J. W., Liu, C. Y., Pan, Y., Hu, L. H., Fang, J. *, **Wang, Z. D. *, Combust. Flame.2022, 242**, 112214

[2] Hu, Z. H.[1], Di, Q. M.[1], Liu, B. Z.[1], Li, Y. B., He, Y. R., Zhu, Q. B., Xu, Q., Dagaut, P., Hansen, N., Sarathy, S. M., Xing, L. L. *, Truhlar, D. G.*, **Wang, Z. D.***, ***Proc. Natl. Acad. Sci.* 2023, 120(10)**, e2220131120

Non-Statistical Predissociation of $SO_2(\tilde{C}^1B_2)$ through Competing Pathways

Yifei Xu,[1,5] Bayaer Buren,[2*], Junyan Wang,[1] Xixi Hu,[3] Daiqian Xie,[1] Hua Guo,[4] and Shanyu Han[5,6*]

1. *Institute of Theoretical and Computational Chemistry, Key Laboratory of Mesoscopic Chemistry, School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, China*
2. *School of Science, Shenyang University of Technology, Shenyang 110870, China*
3. *Kuang Yaming Honors School, Institute for Brain Sciences, Nanjing University, Nanjing 210023, China*
4. *Department of Chemistry and Chemical Biology, Center for Computational Chemistry, University of New Mexico, Albuquerque, New Mexico 87131, USA*
5. *International Center for Isotope Effects Research, State Key Laboratory of Critical Earth Material Cycling and Mineral Deposits, Nanjing University, Nanjing 210023, China*
6. *Frontiers Science Center for Critical Earth Material Cycling, School of Earth Sciences and Engineering, Nanjing University, Nanjing 210023, China*

The photochemistry of sulfur dioxide (SO_2) plays a central role in atmospheric sulfur cycles and the origin of sulfur mass-independent fractionation (S-MIF) recorded in Archean rocks, yet its predissociation mechanism has remained elusive despite decades of study. Here, we present a comprehensive theoretical investigation of the predissociation dynamics of SO_2, treating the coupled $\tilde{C}^1B_2$, $2^3A'$ and $\tilde{X}^1A_1$ states within a rigorously constructed three-state diabatic potential energy matrix. The model incorporates both intersystem crossing and internal conversion via avoided crossing, and GPU-accelerated quantum wave packet dynamics were employed to capture long-lived resonance states. The calculations reproduce experimental product distributions and reveal a non-statistical dissociation mechanism governed by multiple competing resonance pathways. We identify a previously unrecognized indirect dissociation route on the $2^3A'$ surface, enabled by coupling to the $\tilde{C}^1B_2$ / $\tilde{X}^1A_1$ avoided crossing, which accounts for the anomalous inverted v=2 SO population observed near 6.4 eV (the wavelength at 193 nm). These results provide the first unified explanation of energy-dependent product branching, vibrational inversion, and nodal rotational structures in SO_2 photodissociation. The findings highlight the critical role of resonance-mediated dynamics in nonadiabatic photochemistry and establish a general framework for understanding S-MIF produced by SO_2 photodissociation.

Keywords：Photodissociation; Sulfur mass-independent fractionation;

星际中的激发态原子反应：O(¹D)/S(¹D)与甲烷的反应动力学研究

赵华杰[1]，张明明[1]，郝媛杰[1]，帅全[1,*]，杨学明[1]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，大连，116023
*Email: shuaiq@dicp.ac.cn

激发态原子参与的基元反应在星际化学中非常重要，但长期缺乏研究。鉴于此，我们针对激发态氧原子及硫原子与甲烷分子的反应，耦合交叉分子束技术和离子速度成像技术，开展了量子态分辨的反应动力学实验研究，结合高精度的理论计算，发现了反应中新的微观机理。

通过先进的交叉分子束-时间切片离子速度成像实验，结合构建高精度全维全域势能面进行精确动力学计算，我们对 O(¹D)与甲烷分子的反应进行了深入研究。我们测定了反应激发态势能面的势垒[1]。我们发现这个反应的主要机理并不是人们之前认为的插入反应，而是一种新的“陷入式抽取(trapped abstraction)”反应机理[2]。通过红外激发制备 C–H 伸缩振动激发的 CHD_3 分子，我们发现反应物的 C–H 键伸缩振动激发抑制了未激发的 C–D 键的断裂[3]。

我们也开展了 S(¹D)与甲烷分子反应的实验研究。初步实验结果表明，反应主要生成前向散射为主的内能较高的产物，也会生成部分后向散射产物，而侧向散射产物很少。分析产物 CD_3 的 REMPI 谱，我们发现反应可以生成不同振动模式激发的 CD_3 产物。我们推测反应的主要机理与 O(¹D)与甲烷分子反应类似，即也可能存在“陷入式抽取”。

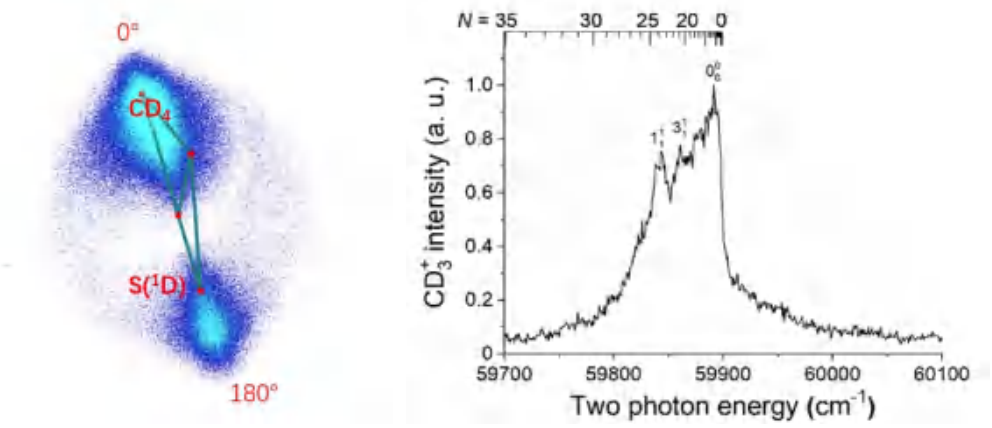


图1： S(¹D)+CD_4反应产物CD_3的速度分布图像及REMPI谱

关键词：交叉分子束；速度成像；激发态；基元反应

参考文献：

[1] Shuai, Q., et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 2012, 3, 1310.

[2] Yang, J., et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 2014, 5. 3106.

[3] Lv, J., et al., *J. Chem. Phys.* 2023, 159, 024301.

Multi-component-isotope-abundance SEPs acceleration: A model driven by coupled fractal turbulence MR and hydrodynamic-magnetodynamic-kinetic evolution across diverse ionization

Bojing Zhu[1,2,3*], Zhihe Wang[1,2], Yongbing Li[4,5], Wu Wang[6], Huiyan[7], Ying Zhong[7],Chunye Gong[8,9], Henry Tufo[10] ,Gabriels Morra[11]

[1]Yunnan Observatorie & Center of Astronomical Mega-Science, CAS, 650216, China

[2]School of Astronomy and Space Science, University of Chinese Academy of Sciences,100049, China

[3]State Key Laboratory of Space Weather, National Space Science Center, CAS,100190, China

[4]Earth and Plentary College, University of Chinese Academy of Sciences,100049, China

[5]Key Laboratory of Earth System Numerical Modelling and Application, CAS,100049, China

[6]Computer Network Information Centre & National Supercomputer Center in CAS, CAS,100083, China

[7]National Supercomputer Center in Guangzhou, Sun Yat-sen University, 510006, China

[8]National University of Defense Technology, 410073, China

[9]National Supercomputer Centre in Tianjin,250103, China

[10]Department of Computer Science,University of Colorado at Boulder, CO80309-0430, USA

[11]Department of Physics, University of Louisianan of Lafayette, 70504-3680, USA

*Email: bjzhu@ynao.ac.cn cynosureorion@ucas.ac.cn

Observational data elucidate key characteristics of SEP populations: (i) multi-component composition, (ii) variable elemental abundances, (iii) isotopic diversity, and (iv) diverse ionization states. Analyzing these species' abundances, charge states, and energy distributions offers critical insights into SEP acceleration dynamics. The multi-component, elemental, and isotopic properties are fundamental to understanding SEP acceleration mechanisms. These properties are typically quantified using elemental ratios (e.g., Fe/O, He/H, C/O), isotopic ratios (e.g., ^{3}He/^{4}He), and abundances of elements such as electrons, protons, helium, carbon, and other metals within the simulation domain. This study investigates impulsive SEP events driven by fully coupled hydrodynamic-magnetohydrodynamic-kinetic continuous-scale flare-loop systems characterized by significant temporal-spatial turbulence and magnetic reconnection. These events, distinguished by current sheet thicknesses on the order of characteristic electron length scales, exhibit enhanced electron and heavy-ion populations and are associated with type III radio bursts. We developed the multi-component-abundance-isotope model, incorporating a relativistic algorithm and advancing the Relativistic hybrid Particle-in-Cell Lattice Boltzmann Method code. These advancements provide innovative tools for analyzing Langmuir turbulence acceleration driven by nonlinear resonant wave-particle interactions.

Keywords ： Multi-component-isotope-abundance SEPs , Fractal turbulence MR, Hydrodynamic-magnetodynamic-kinetic evolution, Diverse ionization, Relativistic hybrid Particle-in-Cell Lattice Boltzmann Method

References：

[1] Zhu, B.J.,et.al., EPP,2019. DOI: 10.26464/epp2019003.
[2] Zhu, B.J.,et.al., Appl Math Model.2020. DOI: 10.1016/j.apm.2019.09.043.
[3] Zhu, B.J.,et.al., Appl Math Model.2020. DOI: 10.1016/j.apm.2019.05.027.
[4] Zhu, B.J.,et.al., ICSTA.2023. DOI: 10.11159/icsta23.122.
[5] Zhu, B.J.,et.al., Phys. Fluids,2025. DOI: 10.1063/5.0297234(Reprint state).
[6] Zhu, B.J.,et.al., Phys. Fluids,2025. DOI: 10.1063/5.0297229(Reprint state).

口头报告

星际含硅与生命前分子的形成与演化研究

杨正海 [1]

[1] 华东师范大学，上海市闵行区东川路 500 号，200241
*Email: zhyang@lps.ecnu.edu.cn

摘要正文：原子、分子、离子等普遍存在于天体与星际空间、等离子体、地球大气、化学反应和生物体中。近年来大型空间与地面望远镜获得大量观测数据并发现超过 300 个星际分子结构，其中包含众多新奇含硅与生命前分子。然而大多数分子是如何自上而下或自下而上形成仍然是未知的，尤其是其中很多分子的天文观测丰度与天体化学模型预测值之间存在巨大差异。由此，如何通过实验室研究一方面揭示这些分子形成路径，另一方面阐述观测丰度与模拟值之间不符的原因是一个重要的科学问题。报告人近年来基于化学动力学方法，聚焦天体环境关键多原子分子及候选分子，研究了 AGB 恒星星周包层新奇含硅分子的微观生成机制；冷分子云环境下多环芳烃(PAHs)生长过程；以及泰坦大气环境自由基-分子碰撞生成含氮小分子并进一步生长为生命前分子的路径。

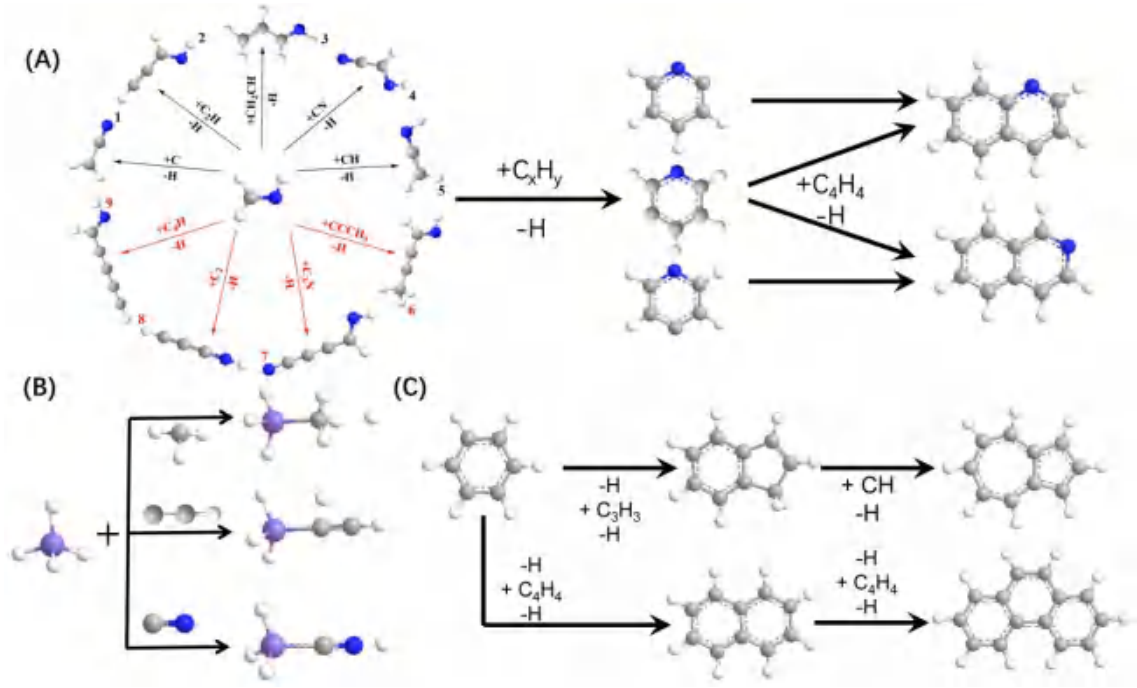


图 1：星际生命前分子(A)，含硅分子(B)和多环芳烃分子(C)的部分形成与演化路径。

关键词：星际介质；含硅分子；生命前分子；化学动力学

参考文献：

[1] Yang, Z.; et al. *ACS Central Science* 2025, 11, 322-330.
[2] Yang, Z.; et al. *PNAS* 2024, 121, e2409933121.
[3] Yang, Z.; et al. *Nature Astronomy* 2024, 8, 856-864.
[4] Yang, Z.; et al. *Science Advances* 2023, 9, eadi5060.
[5] Yang, Z.; et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144, 22470-22478.

同步辐射光电离质谱探究炔丙基自由基的电子调控反应

官觊文[1,*]，张锦阳[1]，高姣[2]，王占东[1,*]

[1] 中国科学技术大学，安徽合肥
[2] 安徽第二医学院，安徽合肥
*Email: jguan43@ustc.edu.cn; zhdwang@ustc.edu.cn.

摘要正文：理解多环芳烃（PAHs）的生长机制对于燃烧科学、天体化学和碳基纳米材料合成至关重要。最近我们探究了以丙炔基（•C_3H_3）星际分子为核心的自由基-自由基双分子反应。研究发现，•C_3H_3 与三种环戊稠合 PAH 自由基—1-茚基（•1-C_9H_7）、苊烯基（•$C_{12}H_9$）和 4H-环戊[def]菲基（•$C_{15}H_9$）—的反应表现出显著的选择性：当•C_3H_3 以其主导的丙炔-3-基共振电子构型参与反应时，始终生成全六元环结构的 PAHs；而当其以次要的丙二烯-1-基共振电子构型反应时，则选择性地保留了五元环并形成一个新的六元环结构。通过分子束取样同步辐射光电离质谱与气相色谱-质谱联用技术，研究成功观测并识别了难以捕捉的反应中间体和异构体产物。互补的实验结果表明，丙二烯-1-基加成路径具有高度选择性，且该过程受热力学控制。这些发现基于多种实验能力的结合，为碗状 PAHs（作为星际富勒烯和纳米管结构模板）的选择性形成提供了新机制和新见解。丙二烯-1-基路径的高选择性为环戊稠合 PAHs 的理性合成提供了一种有效策略，该路径在高温燃烧、拱星包层和冷分子云等多种环境中均可通过无势垒、易进行的自由基-自由基反应途径实现。

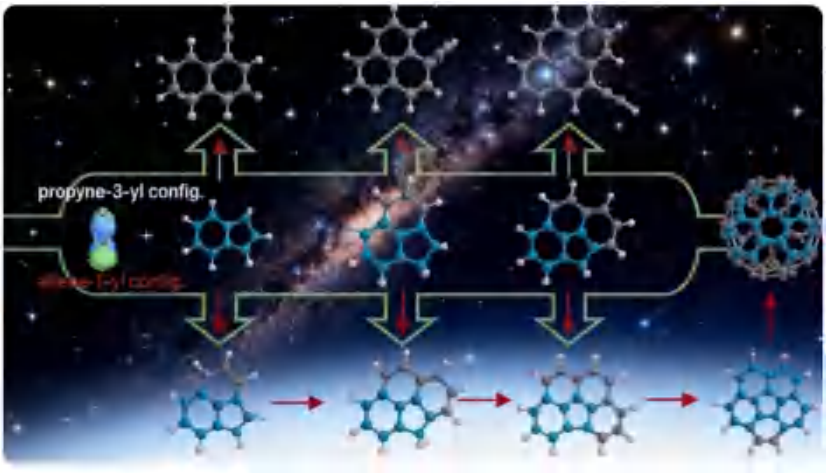


图1：炔丙基共振电子构型调控的多环芳烃生成机理

关键词：炔丙基；多环芳烃；自由基反应；光电离质谱

参考文献：

[1] J. Zhang, J. Gao, J. Guan*, D. G. Truhlar*, Z. Wang*, *J. Am. Chem. Soc.* 147, 9283, 2025.

[2] J. Gao, J. Guan*, Y. Hu*, *J. Chem. Phys.*, 163, 094303, 2025.

冷分子反应的含时量子波包研究：相互作用区解耦方法

黄嘉宇 [1,2,*]，方月谷 [1]，张东辉 [1,*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所化学反应动力学全国重点实验室，大连市，116023
[2] 大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室，大连市，116024
*Email: jyhuang@dlut.edu.cn; zhangdh@dicp.ac.cn

在星际介质和行星大气中，许多关键反应发生在低温下，并常常伴随深势阱和长寿命复合物的形成。如何在理论上精确刻画这些过程，一直是分子反应动力学的重大挑战。近年来，我们发展了含时量子波包方法，并将其应用到多原子冷反应体系以及涉及非绝热耦合的复杂反应中，从而拓展了冷反应理论研究的可能性。然而，对于存在深势阱的体系，传统方法的计算代价仍然非常高昂。为解决这一问题，我们提出了相互作用区解耦策略。在反应区引入功能化吸收势，可以将动力学自然划分为反应物和产物两个子空间。该框架既能与含时波包方法高效结合，又能在局部区域构建更合适的基组，从而显著降低计算成本。以 F+HD 和 O+OH 反应为例，我们展示了该方法在保持态-态反应计算分辨率的同时，使计算效率提高了两个数量级以上。这一方法为研究天体化学中的多原子复合物反应提供了一条可行的途径，也为理解复杂的星际反应网络奠定了基础。

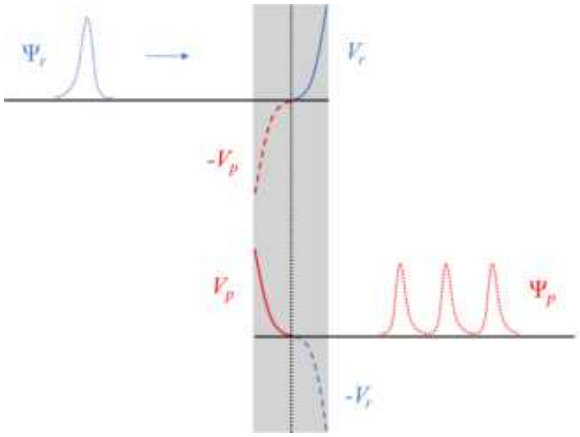


图1：用于一维散射体系含时波包计算的相互作用区解耦策略示意图

关键词：冷分子反应；含时量子波包方法；相互作用区解耦；功能化吸收势

参考文献：

[1] Huang, J; Liu, S; Zhang, D.; Krems. R. *Phys. Rev. Lett.*, **2018**, **120**: 143401.

[2] Huang, J; Chen, J; Liu, S; Zhang, D. *J. Phys. Chem. Lett.*, **2020**, **11**: 8560.

[3] Fang, Y.; Huang, J.; Zhang, D. arXiv **2025**, 2507: 23531.

星际超氢化多环芳烃的多光子解离动力学与红外光谱研究

Zeyuan Tang[1,2,*], Frederik G. Doktor[2], Rijutha Jaganathan[2], Julianna Palotás[3], Jos Oomens[3], Liv Hornekær[2], Bjørk Hammer[2]

[1]School of Chemistry and Chemical Engineering, Hainan University, Haikou 570228, China
[2]Center for Interstellar Catalysis (InterCat), Department of Physics and Astronomy, Aarhus University, Ny Munkegade 120, 8000 Aarhus C, Denmark

[3]Radboud University, Institute for Molecules and Materials, FELIX Laboratory, Toernooiveld 7, 6525ED Nijmegen, The Netherlands
*Email: zytang@hainanu.edu.cn

多环芳烃是星际介质中广泛存在的有机分子，其超氢化衍生物 HPAHs 在分子氢和小分子碳氢化合物的形成中可能扮演关键角色。本研究结合红外多光子解离 IRMPD 实验、分子动力学模拟与密度泛函理论计算，系统研究了超氢化芘类分子的光致解离动力学[1,2]与红外光谱特征[3]。

研究发现，超氢化芘的碎片化路径强烈依赖于其边缘氢化结构：具有“三重组”结构的[pyrene+7H]$^+$倾向于通过质子迁移释放 C_2H_4，而具有“双重组”结构的[pyrene+5H]$^+$则更易通过 H_2 损失形成闭壳结构碎片[1]。分子动力学模拟进一步揭示了质子扩散在 H_2 形成中的关键作用，其能垒低于单个 H 原子损失，表明 HPAHs 可在强紫外辐射环境中作为有效的 H_2 催化剂[2]。

此外，我们发展了基于机器学习势函数的分子动力学方法，用于研究阳离子芘及其超氢化衍生物的红外光谱非谐性效应[3]。结果表明，谐性近似适用于部分氢化体系，但对全氢化芘则必须考虑非谐性效应才能与实验光谱吻合。温度升高导致谱线红移与展宽，这对理解 JWST 观测到的 AIBs 谱线轮廓具有重要启示。

本研究揭示了 HPAHs 边缘结构对其碎片化路径与光谱特性的调控作用，为理解星际介质中 H_2 和 C_2H_4 的“自上而下”形成机制提供了新视角。

关键词：多环芳烃；星际介质；分子动力学；机器学习势

参考文献：

[1] Z. Tang, F.D.S. Simonsen, R. Jaganathan, J. Palotás, J. Oomens, L. Hornekær, and B. Hammer, **Astron. Astrophys**. 663, A150 (2022).

[2] F.D.S. Simonsen, R. Jaganathan, J. Palotás, Z. Tang, B. Hammer, J. Oomens, and L. Hornekær, **Astrophys. J** 972(1), 42 (2024).

[3] Z. Tang, F.G. Doktor, R. Jaganathan, J. Palotás, J. Oomens, L. Hornekær, and B. Hammer, **J. Chem. Phys.** 163(4), 044304 (2025).

预训练模型加速反应势能面构建与动力学研究

付艳林，傅碧娜*，张东辉

中国科学院大连化学物理研究所，大连，116023
*Email: bina@dicp.ac.cn

分子反应动力学是从原子与分子尺度研究化学反应机理的学科，是现代化学研究的前沿领域。其中，高精度分子反应势能面的构建是分子反应动力学理论研究的核心基础，其精度直接决定了反应路径解析与速率预测的可靠性，因此在该领域占据关键地位。然而，复杂多原子体系的势能面构建不仅需要庞大的高精度数据，还面临维度高、计算量大及可扩展性不足等挑战。如何高效利用数据集、提高势能面的可扩展性，并实现高精度复杂多原子体系势能面的快速构建，是当前制约理论研究发展的主要瓶颈。

单原子自由基与饱和烷烃（C_nH_{2n+2}）反应在基础研究与工业催化等领域具有重要价值。然而，鉴于十原子以上体系高精度全维反应势能面构建难度极大，目前对 C2 及更高维度体系的动力学研究仍显著少于 C1 体系。针对这一现状，我们基于可扩展的原子表示方法（如 DPA、MACE 等），开发适用于单原子自由基-烷烃反应的专有势能预训练模型。通过少量高精度从头算数据进行微调，将模型拓展至 C3 以上烷烃体系，构建全维全域的高精度反应势能面。根据我们的测试，构造化学精度（1 kcal/mol）势能面所需数据量可缩减到基准的百分之一以内，大幅降低了高精度量子化学计算的开销。并以此为基础，进一步开展动力学模拟，系统的研究了氢抽取以及氢取代反应的动态过程。在不同初始条件下，计算各产物的速率常数、产物分支比以及散射角等动力学信息，揭示单原子自由基与烷烃的反应机理。本研究突破传统大体系势能面构建对大量计算资源的严重依赖，实现小体系向大体系的精准拓展，为深入理解多原子反应动力学本质奠定基础，为激光化学、燃烧化学等研究提供理论支撑。

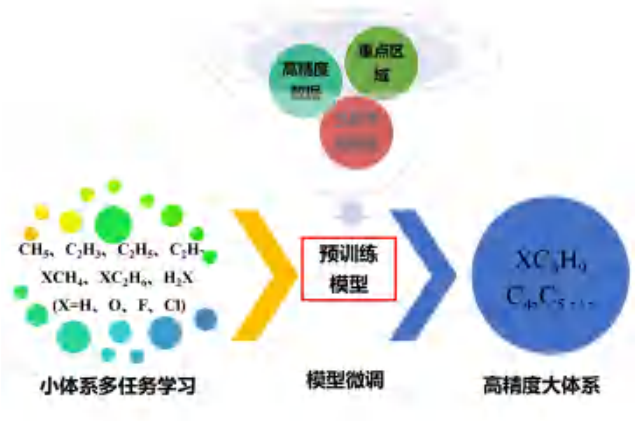


图 1：基于预训练模型的势能面构建示意图

关键词：预训练模型；单原子自由基；饱和烷烃

参考文献：

[1] B. Fu, D. H Zhang, National Science Review 2023,10: nwad321.

[2] J. Behler, Chemical Reviews 2021,121: 10037.

[3] Y. Zhang, J. Xia, B. Jiang, Physical Review Letters 2021, 127: 156002.

On the Three-dimensional Fractal Structure of Local Star-Forming Regions

Author (Bo-wei Zhao)[1,2*], Second Author(Chao Liu) [1,2*], Corresponding Author(Juan-juan Ren)[1]

[1]Key Laboratory of Space Astronomy and Technology, National Astronomical Observatories, CAS, Beijing 100101, China

[2]University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

*Email:, liuchao@nao.cas.cn, zhaobw@nao.cac.cn

Context. Star formation is a complex process that is not yet fully understood. The structure of the interstellar medium and its molecular clouds plays a crucial role, and understanding how their morphology and boundary complexity vary with stellar mass is essential for uncovering the mechanisms that regulate star formation.

Aims. This study investigates the boundary complexity of star-forming regions using 3D extinction data in Cartesian coordinates, quantifying it using a perimeter–area fractal dimension analysis.

Methods. By projecting the 3D extinction map onto the x, y, and z planes, we focus on the z-projection, where the fractal dimension shows clear mass-dependent trends. Unlike previous studies, we apply a threshold-slicing approach in which column density maps are segmented by thresholds, converted into binary maps, and then used to compute perimeters and areas. This enables us to trace the relation between the fractal dimension and column density, revealing how molecular cloud boundary complexity correlates with physical conditions across star-forming regions.

Results. In our analysis, the Lupus and Taurus star-forming regions exhibit relatively high fractal dimensions even at low column densities, indicating that their cloud boundaries become geometrically complex in diffuse environments. In contrast, regions such as Orion A, Orion B, Orion λ, Cepheus, and Perseus display the opposite trend: their fractal dimensions remain low at low densities and increase only at higher column densities, suggesting that significant structural fragmentation and boundary complexity arise predominantly in denser gas. This contrast highlights a fundamental difference in how low- and high-mass star-forming regions evolve and may reflect distinct physical conditions or processes governing cloud fragmentation and star formation.

Conclusions. The structure of star-forming regions appears to be linked to the mass of the stars they form. We find clear evidence that regions of different mass exhibit distinct fractal structures. However, the physical mechanisms driving this behavior remain uncertain.

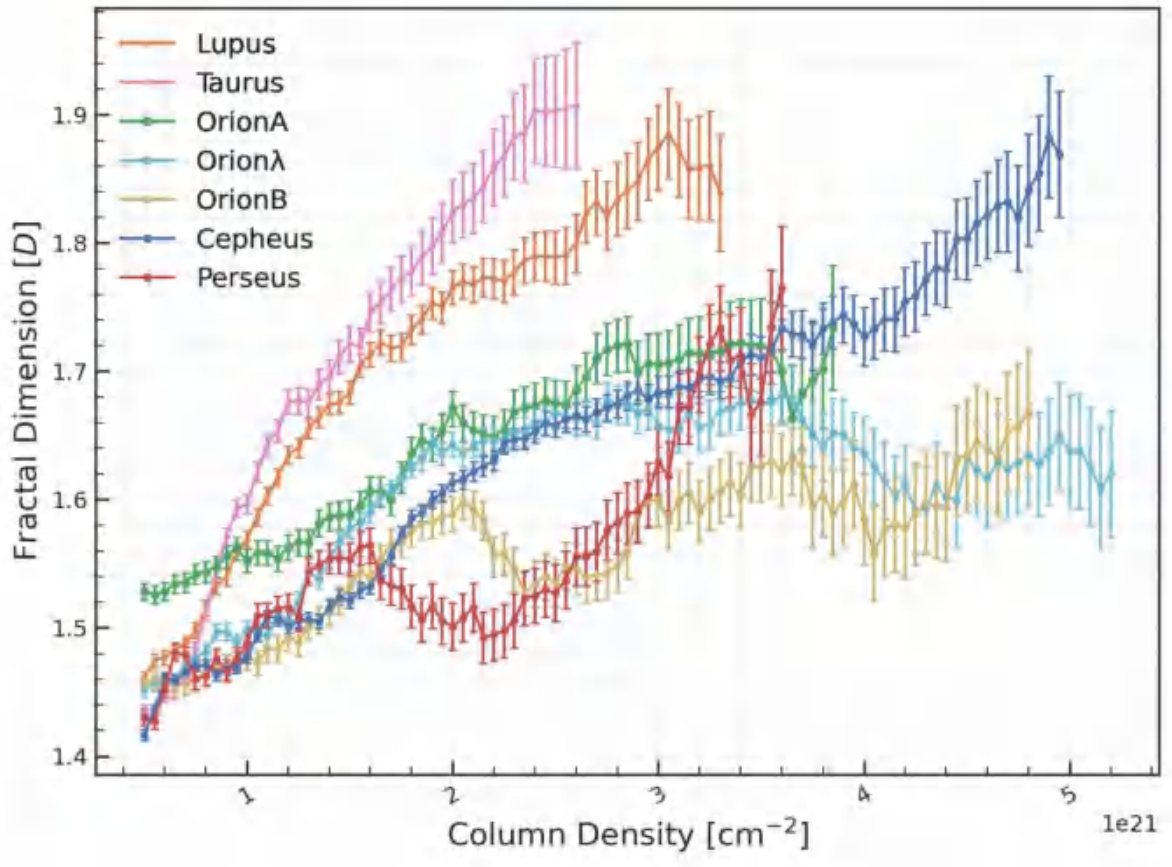


Fig. 1 Fractal Dimension of Star-Forming Regions

Keywords： methods: fractal – stars: formation – ISM: clouds – ISM: structure

References：

[1] Elmegreen, B. G. 2002, ApJ, 564, 773.
[2] Leike R. H., Glatzle M., Enßlin T. A., 2020, A&A, 639, A138.
[3] Zucker C., et al., 2021, ApJ, 919, 35.
[4] Marchuk, A. A., Smirnov, A. A., Mosenkov, A. V., et al. 2021, MNRAS, 508, 5825.
[5] Sanchez, N., Nespoli, E., Gonzalez, M., & Climent, J. B. 2024, A&A, 688, A224.

Spectuner-D1: Spectral Line Fitting of Interstellar Molecules Using Deep Reinforcement Learning

Yisheng Qiu[1,*], Tianwei Zhang [1], Lie Liu[2], Fengyao Zhu[1], Dezhao Meng[2,3,4], Huaxi Chen[1], Thomas Möller[5], Peter Schilke[5], Donghui Quan[1,*]

[1]Research Center for Astronomical computing, Zhejiang Laboratory, Hangzhou 311121, China
[2]Shanghai Astronomical Observatory, Chinese Academy of Sciences, 80 Nandan Road, Shanghai 200030, China
[3]Xinjiang Astronomical Observatory, Chinese Academy of Sciences, Urumqi 830011, People's Republic of China
[4]University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, People's Republic of China
[5]I. Physikalisches Institut, Universit¨at zu K¨oln, Z¨ulpicher Straße 77, 50937 Cologne, Germany
*Email: yishengq@zhejianglab.org; donghui.quan@zhejianglab.org

Spectral lines from interstellar molecules provide crucial insights into the physical and chemical conditions of the interstellar medium. Traditional spectral line analysis relies heavily on manual intervention, which becomes impractical when handling the massive datasets produced by modern facilities like ALMA. To address this challenge, we introduce a novel deep reinforcement learning framework to automate spectral line fitting. Using observational data from ALMA, we train a neural network that maps both molecular spectroscopic data and observed spectra to fitting parameters such as excitation temperature and column density. The neural network predictions can serve as initial estimates and be further refined using a local optimizer. Our method achieves consistent fitting results compared to global optimization with multiple runs, while reducing the number of forward modeling runs by an order of magnitude. We apply our method to pixel-level fitting for an observation of the G327.3-0.6 hot core and validate our results using XCLASS. For a 100 × 100 region covering 5 GHz bandwidth, our code fits methanol spectra in a few minutes using a desktop with 16 cores and one consumer-grade GPU card.

RAYTHEIA: A high-performance ray-tracing algorithm for three-dimensional astronomical simulations

Zhengping Zhu[1], Thomas G. Bisbas[1,*], Xuefei Tang [1], Huaxi Chen [1]

[1]Research Center for Astronomical Computing, Zhejiang Laboratory, Hangzhou 311100, China

We introduce RAYTHEIA, a novel reverse ray-tracing algorithm designed to evaluate the attenuation of the far-ultraviolet radiation in Photodissociation regions (PDRs) simulations. Built on a uniform Cartesian grid combined with the HEALPix scheme for uniformly emanating rays across the celestial sphere, RAYTHEIA incorporates innovative methods to enhance computational accuracy and performance. A key feature of RAYTHEIA is its octree-based approach for efficiently identifying grid-ray intersections, coupled with a slab-method calculation for determining analytically the penetration lengths. Additionally, RAYTHEIA employs a dual-grid distributed parallel framework with chunk-to-chunk communication achieves exceptional parallel efficiency. Our results demonstrate excellent precision and a performance improvement of several orders of magnitude compared to classical ray-tracing methods. The algorithm's accuracy and performance have been tested using turbulent ISM configurations. These findings establish RAYTHEIA as a powerful tool for high-resolution astronomical models including photodissociation region models, offering unprecedented speed and scalability.

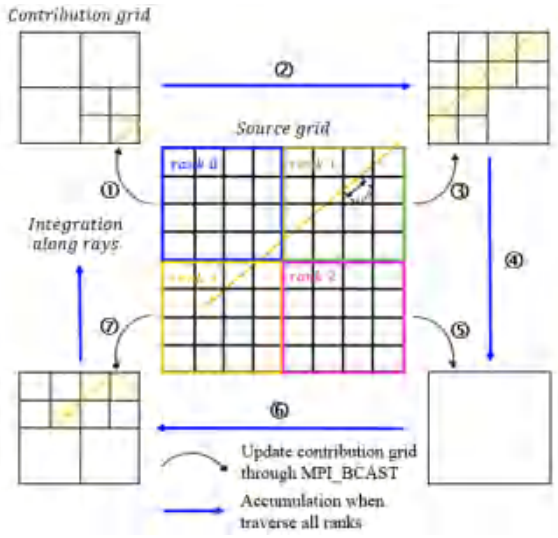


Fig. 1 The parallel framework of RAYTHEIA

Keywords：photodissociation region, reverse ray-tracing, parallel framework

References：

[1] Bisbas T.; Bell T.; Viti S.; Yates J.; Barlow M. 2012, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 427, 2100.

[2] Wünsch R.; Walch S.; Dinnbier F.;Seifried D.; Haid S.; Klepitko A.; Whitworth A. P.; Palouš J. 2021, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 505, 3730

A JWST Study of Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Emission in a Region of 30 Doradus

Congcong Zhang[1,2,3,*], Joelene Hales[2], Els Peeters[2,4,5], Jan Cami[2,4,5], Ameek Sidhu[2,4], Junfeng Zhen[2,4,5]

[1]Hunan Key Laboratory for Stellar and Interstellar Physics, and School of Physics and Optoelectronics, Xiangtan University, Hunan 411105, People's Republic of China
[2]Department of Physics & Astronomy, The University of Western Ontario, London N6A3K7, Canada
[3]CAS Key Laboratory for Research in Galaxies and Cosmology, Department of Astronomy, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, People's Republic of China
[4]Institute for Earth and Space Exploration, The University of Western Ontario, London N6A3K7, Canada
[5]Carl Sagan Center, SETI Institute, 339 Bernardo Avenue, Suite 200, Mountain View, CA94043, USA
*Email: zhangcongcong@mail.ustc.edu.cn

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are responsible for strong mid-IR emission features near star-forming regions. It is well known that low-metallicity environments exhibit weaker PAH emission, but it is not clear how the metallicity affects the properties of the emitting PAH population. We present a detailed study of the PAH emission in a region of 30 Dor, a well-known low-metallicity star-forming environment in the Large Magellanic Cloud (LMC) and we compare it to the PAH emission in the Orion Bar to investigate the characteristics of the PAH population and how the environments affect the resulting IR emission. We analyze *JWST* observations of 30 Dor that include imaging (NIRCam, MIRI) and spectroscopy (NIRSpec/IFU, MIRI/MRS). We extracted NIRSpec/IFU and MIRI/MRS spectra from 18 apertures that cover the morphological structures present within the observed region of 30 Dor. We characterize the profiles and relative intensities of PAH emission in these apertures. The detailed profiles of the PAH emission bands in 30 Dor are all similar and match with one of the dissociation fronts (DF2) in the Orion Bar, but their relative band ratios show a much larger range than in the Orion Bar. The PAH emission in 30 Dor originates from a population with a lower or similar ionization fraction than in the Orion Bar, and a size distribution that has more small-sized PAHs. Since smaller PAHs typically photo-fragment before larger PAHs, our findings support the hypothesis that the lower PAH emission for lower metallicities is the result of inhibition of growth toward larger PAHs rather than photo-fragmentation.

Keywords： Astrochemistry; Large Magellanic Cloud; Interstellar medium; Infrared spectroscopy; Interstellar molecules; Polycyclic aromatic hydrocarbons

References：

[1] Congcong Zhang *et al* 2025 *ApJS* 280 4
[2] Congcong Zhang *et al* 2023 *A&A* 669 A41

Formation of multiplicity in massive protostellar clusters

Shanghuo Li[1,*], Henrik Beuther[2], Patricio Sanhueza[3], Keping Qiu[1], et al

[1]School of Astronomy and Space Science, Nanjing University, Nanjing, China
[2]Max Planck Institute for Astronomy, Heidelberg, Germany.
[3]Department of Astronomy, School of Science, The University of Tokyo, Tokyo, Japan

*Email: shli@nju.edu.cn

Abstract Massive stars (M > 8 Msun) in the Milky Way are overwhelmingly (>80%) found in binary or higher-order multiplicity systems, which play a curial role in shaping cluster dynamics and stellar evolution. However, our understanding of multiplicity formation processes is still limited. To investigate how massive stars and their associated clusters form across a range of spaial scales, we have conducted a systematic observational program using interferometric data. Our studies have yielded promising insights into the formation of massive protostars and protoclusters. In this talk, I will present a detailed overview of our recent investigation into the formation of high-order multiplicity via core and disk fragmentation in massive star-forming regions.

Keywords：Star formation, Binary formation, Multiplicity formation

References：

[1] Li, S.; et al. *Nature Astronomy.* 2015, Advanced Online Publication.

[2] Li, S.; et al. *Nature Astronomy.* 2014, 8: 472-481.

重离子辐照 CO 团簇分子解离和结构重排

张驰军[1]，何佼[1]，张瑞田[2,*]

[1] 深圳技术大学工程物理学院，广东省深圳市坪山区兰田路 3002 号

[2] 中国科学院近代物理研究所，甘肃省兰州市城关区南昌路 508 号
*Email: zhangrt@impcas.ac.cn

分子团簇在光子、电子及离子作用下的动力学行为，对于理解辐射场中的星际化学反应具有重要意义。尽管受限于直接观测的困难，目前尚无明确证据表明分子团簇在星际空间中广泛存在，但实验研究已证实，某些分子（例如 CO）在几十开尔文以下的低温环境中能够通过范德华相互作用形成稳定的团簇结构。本研究报道了 Ar^{2+}与 CO 团簇碰撞所诱导的解离和结构重排过程。通过库伦爆炸成像技术，我们测量了反应产物的动量与能量分布。在 $Ar^{2+} + (CO)_2 \rightarrow Ar + CO^+ + CO^+$的解离通道中，产物 CO^+的不对称的电荷分布，导致其具有较大的静电偶极矩（2.78 Debye）。结合动力学模拟分析发现，该静电偶极矩引起 CO^+碎片发生超快转动激发，这一现象为理解以转动跃迁为主导的分子云冷却机制提供了一条潜在途径。

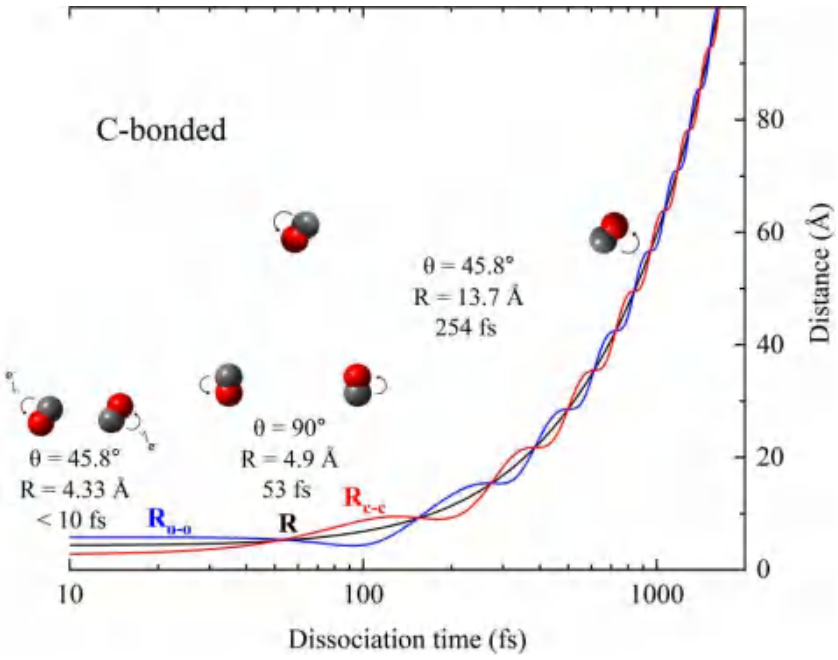


图1：C成键的$CO^+ \cdot CO^+$核间距和CO^+取向随解离时间的关系

关键词：分子团簇，库伦爆炸成像，重离子辐照，解离

参考文献：

[1] Farges, J., de Feraudy, M. F., Raoult, B. & Torchet, G. Surface Science 106, 95-100 (1981).

[2] Boll, R. et al. Nat. Phys. 18, 423-428 (2022).

[3] 1. Stockett, M. H. et al. Nat Commun 14, 395 (2023).

星际空间的单分子反应动力学：背景辐射-碰撞竞争活化机制

赵晓睿[1,2]，张芮铭[1,3]，许雪飞[1,3,*]，徐海涛[1,2,*]

[1]清华大学燃烧能源中心，北京，100084
[2]清华大学航天航空学院，北京，100084
[3]清华大学能源与动力工程系，北京，100084

*Email: xuxuefei@tsinghua.edu.cn；hxu@mail.tsinghua.edu.cn

在广袤的星际空间内，不同区域的环境压力、温度差异极大，单分子气相化学反应可能通过背景红外辐射和分子间碰撞两种途径激活，导致相关非平衡反应动力学的理论计算研究复杂化。理解辐射与碰撞激活机制之间的相互作用及竞争关系，对于采用合适模型准确评估单分子反应速率常数至关重要。我们以几类典型的星际气相单分子反应为目标研究体系，基于主方程方法和拓展的 Lindemann 理论，探究了背景辐射-碰撞竞争活化下的反应动力学。并提出无量纲数 PR， 即分子间碰撞频率与光子吸收强度的比值，以其作为衡量两种活化机制相对重要性的无量纲判据，并基于分子特性的量级分析确定了两种机制主导性转换边界的参考值 PR*约为 10。因为无需化学反应的详细模拟，只需环境参数和分子特性信息即可估算 PR 值，因此可将 PR 作为详细反应动力学计算前的先验评估指标。我们进一步通过两个实际星际反应验证了该判据的合理性，实现了在星际环境下对两种活化机制的主导区域的准确区分。这一研究为简化星际化学反应动力学计算建模以及理解物质循环提供了重要的理论依据。

关键词：单分子反应；辐射活化；碰撞活化；主方程；速率常数

参考文献：

[1] Zhao, X.; Zhang, R. M.; Xu, X.; Xu, H. *The Astrophysical Journal,* 2025, 981: 112.

磷氢化合物的光化学反应研究

卢博[1,*]，马佳楠[1]，曾小庆[2,*]

[1]河北师范大学，河北省石家庄市南二环东路 20 号，050024
[2]复旦大学化学系，上海市杨浦区淞沪路 2005 号，200433
*Email: bolu@hebtu.edu.cn; xqzeng@hebtu.edu.cn

磷氢化合物 PH 和 PH_3 作为生命相关的两类含磷物种，在磷化学中扮演着重要角色，在不同的星际介质和星周环境中如金星、木星和碳星 IRC+10216 中被观测到。PH_3 在气木星的大气中发生的光降解过程中生成的各种其他磷氢化物及单质磷，被认为是造成大红斑显红色的原因[1]。作为最简单的活泼磷烯双自由基 PH 被认为是 PH_3 光化学反应中的瞬态中间体，其化学性质仍有待进一步探索。P_2H_2 作为 PH 的二聚体，早在 1966 年 Fehlner 等人利用质谱研究 PH_3 的分解产物时提出了它的存在，随后的几十年间，Schaefer 等人对它的分子结构、成键特征、分子光谱和异构化过程进行了充分的理论研究，但是受限于它的高反应活性，使得其光谱探测充满挑战尚未见报道。

我们利用低温基质隔离方法，通过在氮气和惰性气体基质中（Ar、Ne 等，10 K）紫外激光光解 PH_3 和 P_2H_4，首次捕获到了 PH 和氮气的反应产物 HPN_2 分子以及具有顺/反两种构象的 H_2P_2 分子[2-3]。在对其红外和紫外/可见吸收光谱进行充分表征的基础上，进一步光化学研究发现 HPN_2 会发生分解反应生成 PN_2，而 H_2P_2 则会异构化成单重态 H_2PP，并可以被 CO 捕获生成 H2PPCO。理论计算表明，HPN_2 和 HN_3 类似，可以发生 1,2 双极化环加成反应，反应能垒与 HN3 相近；分子共振结构分析表明，HPN_2 以 P-N 单键和 N═N 三键为主要存在形式。P_2H_2 分子中 P=P 键的键级为 2.0 左右，表明其为简单原型 P　P 多重键分子。该研究填补了活泼 H_2P_2 长时间被理论预测但尚未有实验报道的空白，预示着 P_2H_2 为潜在含磷星际分子，揭示了 PH 双自由基活化氮气分子的微观反应机理。

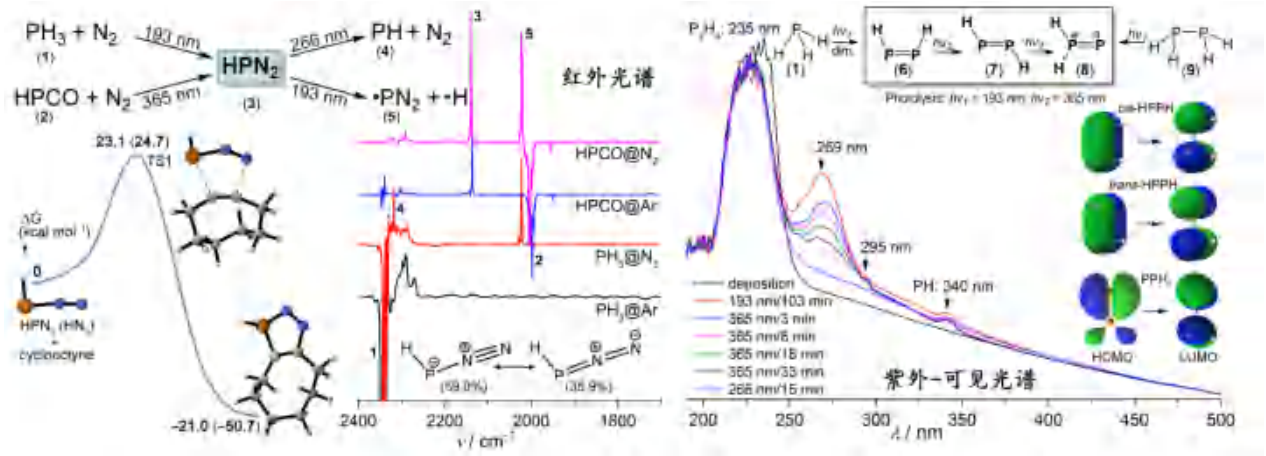


图1：磷氢化合物的光谱探测和反应研究

关键词：磷氢化合物；基质隔离；红外光谱；光化学；理论计算

参考文献：

[1] Ferris, J. P.; Benson, R. *Nature* **1980**, **285**: 156.

[2] Lu, B.; Shao, X.; Jiang, X.; Wang, L.; Xue, J.; Rauhut, G.; Tan, G.; Fang, W.; Zeng, X. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, **144**: 21853.

[3] Lu, B.; Wang, L.; Jiang, X.; Rauhut, G.; Zeng, X. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, **62**: e202217353.

非极地地区月壤中 OH 和 H_2O 的含量和分布

于雯[1,7,8]，晏浩[2,3*]，唐红[1,7,8*]，李雄耀[1,7,8]，魏榆[2,3]，鲍惠铭[2,3]，周传娇[1]，莫冰[1,8]，吴炎学[4]，罗海洋[5]，郝佳龙[6]，李瑞英[6]，魏广飞[9,1]，曾小家[1]，刘建忠[1,7,8]

1 中国科学院地球化学研究所月球与行星科学中心，贵阳，550081，中国
2 南京大学地球科学与工程学院国际同位素效应研究中心，南京，210023，中国
3 南京大学地球科学与工程学院矿产资源研究国家重点实验室关键地球物质循环前沿科学中心，南京，210023，中国
4 广东工业大学分析测试中心，广州，510006，中国
5 普林斯顿大学地球科学系，普林斯顿，新泽西，美国
6 中国科学院地质与地球物理研究所地球与行星物理重点实验室，北京，10029，中国
7 中国科学院行星比较研究卓越中心；合肥，230026，中国
8 中国科学院空间制造技术重点实验室，北京，100094，中国
9 深空探测实验室，合肥，230026，中国
*Email：晏浩（yanhao@nju.edu.cn），唐红（tanghong@vip.gyig.ac.cn）

摘要正文：根据阿波罗任务的研究结果，月球非极区表面给人一种极干燥的印象。然而，2009 年在月球表面发现了广泛分布的 3 μm 吸收特征，这一现象被视为 OH/H2O 存在的标志。然而，对于分子水（H2O）和其他含羟基（OH）化合物对 3μm 吸收特征的相对贡献以及 OH/H2O 含量的时空变化仍然不清楚。回答该问题有助于估算月球表面的水资源，是未来的太空探索计划有重要指示意义。本研究测量了从月球表面及 1 米深度的嫦娥五号土壤颗粒表层 1μm 内的氢含量和同位素组成。此外，我们还开展了室内实验，来模拟太阳风 H 离子注入过程，揭示温度对太阳风成因 OH 和颗粒表面吸附水逃逸的影响。结果表明，绝大部分太阳风成因 OH 可以在月壤颗粒中保留，含量约为 48–95 ppm H2O 当量。该含量随纬度的变化较小，并且没有昼夜变化。结合已发表的遥感数据，我们提出，月表非极区的次表层中存在高含量的分子水（约 360±200 ppm H2O），它们的迁移导致了 3 μm 处吸收峰的纬度和昼夜变化。我们在本研究中提出的 OH 和 H2O 的含量和分布可以解释已发表的不同仪器（包括红外/紫外光谱和中性质谱仪）的看似矛盾的观测结果。本项工作的研究结果为未来的月球研究和太空任务提供了新的见解。

关键词：水；羟基；太阳风；月球；红外光谱

墙报

The Chemical Structure of Young High-mass Star-forming Clumps. III. Low Temperature Chemistry

Lehan Gao[1], Siyi Feng [1,*], Shuting Lin [1], Fujun Du [2, 3]

[1] Department of Astronomy, Xiamen University, Zengcuo'an West Road, Xiamen, 361005
[2] Purple Mountain Observatory and Key Laboratory of Radio Astronomy, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210033
[3] School of Astronomy and Space Science, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026
*Email: syfeng@xmu.edu.cn

Star formations are initiated in dense ($n_H > 10^4$ cm^{-3}) and cold ($T < 20$ K) molecular clouds, where molecular deuteration and depletion are two key processes. At a linear resolution of 0.1-0.5 pc, this work generalizes the analysis method on the spatial correction between CO depletion and molecular deuteration from our pilot studies to the entire sample of the Multiwavelength line-Imaging survey of the 70 μm-dArk and bright clOuds (MIAO) project. Comparing the physical and chemical properties within each pair of neighboring 70 μm bright and dark clumps, we find: (1) Robust spatial anticorrelation between the H_2 column density and dust temperature exists across the entire sample; (2) Parsec-scale CO depletion (up to 30), with $C^{18}O$ (2-1) showing pronounced spatial anticorrelation with $H^{13}CO^+$(1-0) and DCO^+(1-0) lines; (3) Differing deuteration enhancement trends, with a temperature range where NH_3 is insensitive to it, HCO^+, NH_2^+, and HNC favoring colder environments, and HCN favoring warmer ones, which may be related to different gas-grain forming paths of these species; (4) Chemical modeling indicates slightly longer chemical timescales in colder regions, with chemical age comparable to free-fall timescales and shorter than contraction timescales. This sample serves as a robust dynamical and chemical laboratory for investing initial star-forming environments.

Keywords ： Stars: formation; Stars: massive; ISM:molecules; Molecule:deuterium; Molecule:depletion

References：

[1] S. Feng, P. Caselli., K. Wang. ApJ. 2019, 883:202
[2] S. Feng, D. Li, P. Caselli. ApJ. 2020, 901:145

CO 自屏蔽效应对光谱特征的依赖性

杨乐乐[1,2]，林莽[1,*]

[1] 深地过程与战略矿产资源全国重点实验室，中国科学院广州地球化学研究所，广州，510630
[2] 地球与行星科学学院，中国科学院大学，北京，100049
*Email: linm@gig.ac.cn

富钙铝包裹体（CAIs）作为太阳系最早形成的固体物质之一，保存了太阳星云初始物质的组成信息。1973 年，Clayton[1]首次在 Allende 陨石的 CAIs 中观测到氧同位素非质量分馏现象，表现为 δ^{17}/δ^{18} 比值接近 1，且重氧同位素显著亏损。目前，CO 自屏蔽效应被广泛用于解释 CAIs 中氧同位素异常的形成机制[2]。然而，已有理论研究在计算该效应时进行了较多的简化[3]，与实际情况存在较大差距，且难以与实验观测结果相符[4]。为精确量化 CO 自屏蔽效应引起的氧同位素分馏对光谱特征的依赖性，本研究聚焦于该模型的光化学反应第一阶段——CO 吸收光子生成激发态分子的过程，基于已测定的光谱常数，对 CO 不同同位素构型体在预解离波段的吸收截面进行了高精度拟合，并系统考虑了自然环境和实验条件下影响光谱特征的关键因素。通过计算，明确了 CO 自屏蔽效应导致的氧同位素分馏对光谱特征的依赖规律。本研究在一定程度上解释了 CO 光解实验结果和早期理论预测之间的差异，为从行星化学角度深入理解太阳系演化过程提供了理论依据。

图 1 给出了在不考虑量子产率以及光强分布影响时（量子产率均为 1，入射光强均匀分布），在不同的平均光学厚度（τ_v，以 $C^{16}O$ 的浓度为参照）处，不同的温度（T = 100K，200K，300K）和激发态寿命（τ = 10^{-10}s, 10^{-11}s, 10^{-12}s）造成的氧同位素分馏特征。

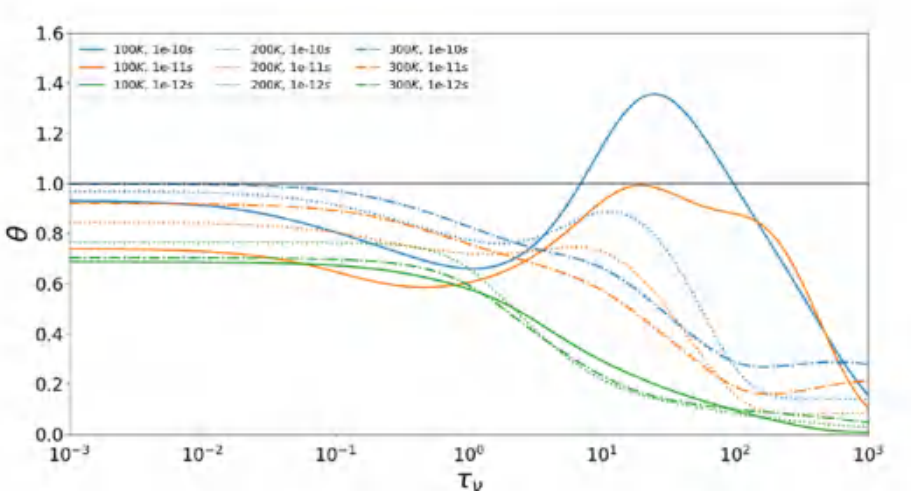


图 1：温度和激发态寿命对氧同位素分馏的影响

关键词：自屏蔽效应；光谱特征；吸收截面；非质量分馏；

[1] Clayton, R. N.; Grossman, L.; Mayeda, T. K. *Science*. 1973, 182: 485-488.

[2] Clayton, R. N. *Nature*. 2002, 415: 860-861.

[3] Lyons, J. R. *Meteorites & Planetary*. 2014, 43(3): 373-393.

[4] Chakraborty, S.; Ahmed, M.; Jackson, L. T.; Thiemens, M. H.; *Science*. 2008, 321: 1328-1331.

Ionizing Radiation Exposure on Arrokoth Shapes a Sugar World

Chaojiang Zhang[1,2,5], Vanessa Leyva[3], Jia Wang[1,2], Andrew M. Turner[1,2], Mason Mcanally[1,2], Ashanie Herath[1,2], Cornelia Meinert [3]*, Leslie A. Young [4]*, Ralf I. Kaiser[1,2]*

[1] *Department of Chemistry, University of Hawaii at Mānoa, Honolulu, HI 96822, USA.*

[2] *W.M. Keck Laboratory in Astrochemistry, University of Hawaii at Mānoa, Honolulu, HI 96822, USA.*

[3] *Université Côte d'Azur, Institut de Chimie de Nice, UMR 7272 CNRS, 06108 Nice, France.*

[4] *Department of Space Studies, Southwest Research Institute, Boulder, CO 80302, USA.*

[5] *State Key Laboratory of Molecular Reaction Dynamics and Dalian Coherent Light Source, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China.*

*Corresponding authors: Cornelia.MEINERT@univ-cotedazur.fr, layoung@boulder.swri.edu, ralfk@hawaii.edu.

Abstract

The Kuiper Belt object (KBO) Arrokoth, the farthest object in the Solar System ever visited by a spacecraft, possesses a distinctive reddish surface and is characterized by pronounced spectroscopic features associated with methanol. However, the fundamental processes by which methanol ices are converted into reddish, complex organic molecules on Arrokoth's surface have remained elusive. Here, we combine laboratory simulation experiments with a spectroscopic characterization of methanol ices exposed to proxies of galactic cosmic rays (GCRs). Our findings reveal that the surface exposure of methanol ices at 40 K can replicate the color slopes of Arrokoth. Sugars and their derivatives (acids, alcohols) with up to six carbon atoms, including glucose and ribose – fundamental building blocks of RNA – were ubiquitously identified. In addition, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) with up to six ring units ($C_{22}H_{12}$) were also observed. These sugars and their derivatives along with PAHs connected by unsaturated linkers represent key molecules rationalizing the reddish appearance of Arrokoth. The formation of abundant sugar-related molecules dubs Arrokoth as a *sugar world* and provides a plausible abiotic preparation route for a key class of bio-relevant molecules on the surface of KBOs prior to their delivery to prebiotic Earth.

References:

[1] C. Zhang, V. Leyva, J. Wang, A. M. Turner, M. Mcanally, A. Herath, C. Meinert, L. A. Young, and R. I. Kaiser, *PNAS*, 121, e2320215121 (2024).

Rotational spectroscopy of 1,2-dihydronaphthalene, 1,4-dihydronaphthalene, and 1,2,3,4-tetrahydronaphthalene

Yuting Li[1], Fang Shen[1], Yan Feng[1], Gang Feng[1,*]

[1]School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University. Daxuecheng South Rd. 55, 401331, Chongqing, China

*Email: fengg@cqu.edu.cn

The rotational spectra of 1,2-dihydronaphthalene (1,2-DHN), 1,4-dihydronaphthalene (1,4-DHN), and 1,2,3,4-tetrahydronaphthalene (1,2,3,4-THN) were measured and analyzed. A single conformation was detected for each molecule. The measurements for the parent iso topologues were extended to include the rotational spectra of all mono-substituted ^{13}C isotopologues for 1,2-DHN and 1,4-DHN. Through the analysis of the experimental spectra, the rotational constants and quartic centrifugal distortion constants were accurately determined. The skeletal structures of 1,2-DHN and 1,4-DHN were derived based on the measured rotational constants. The precise spectroscopic parameters of the three molecules provided in this study enable future exploration of the chemistry of these species in the laboratory and interstellar medium.

Keywords： Microwave spectroscopy; Interstellar molecules; Polycyclic aromatic hydrocarbons; Spectral lines

References：

[1] Y. Li, F. Shen, Y. Feng, W. Lv, H. Huang, J. Huang, G. Feng, *J. Chem. Phys*. 2025, 162, 134301.

Terahertz Spectroscopy with Compact Apochromatic Metasurface Optics

Zhengheng Luo[1,2], R. X. Tang[1,2], G. A. Xie[1,2], L. Dong[1], Y. Ren[1], S. C. Shi[1,*]

[1]Purple Mountain Observatory, CAS, Nanjing, 210023, China

[2]University of Science and Technology of China, Hefei, 230026, China

*Email: scshi@pmo.ac.cn

Terahertz (THz) spectroscopy holds significant importance owing to the abundance of molecular and atomic fingerprint lines within this frequency range, enabling impactful applications in materials science, biology, and astronomy.

Building on recent advancements in metasurface technology, we have developed a THz spectrometer that integrates a phase grating with two transmissive metasurfaces on a single platform. By mitigating chromatic dispersion and angular response limitations, the system incorporates a parallel focusing plane, simplifying integration with detector arrays, enhancing robustness and reducing the requirement for incident light. Operating within the 1.23-1.43 THz range, the spectrometer achieves a theoretical resolution of 21 GHz, with a frequency resolution of 63 (f/Δf). This compact terahertz spectrometer offers scalable solutions for hyperspectral imaging and THz astronomical observation, demonstrating the transformative potential of metasurface technology for miniaturizing high-performance THz spectroscopy systems.

Keywords：Terahertz spectroscopy, metasurface lenses, spectrometer

References：

[1] Ren, Y.; Luo, Z. H.; Xie, G. A.; Liu, D.; Zhou, K. M.; Miao, W.; Zhang, W.; Shi, S. C. Appl. Phys. Lett., 2024, 124(13): 131703.

[2] Faraji-Dana, M.; Arbabi, E.; Arbabi, A.; Kamali, S. M.; Kwon, H.; Faraon, A. Nat. Commun., 2018, 9: 4196.

[3] Datta, S.; Prasertsuk, K.; Khammata, N.; Rattanawan, P.; Chia, J. Y.; Jintamethasawat, R.; Chulapakon, T.; Limpanuparb, T. Molecules, 2022, 27(15): 5040.

[4] Ji, W.; Chang, J.; Mirzaei, B.; Ridder, M.; Jellema, W.; Kao, T.; Lee, A.; Gao, J. R.; Urbach, H. P.; Adam, A. J. L. Laser Photonics Rev., 19(3), 2401290.

高分辨光电子成像装置的搭建与低温负离子光电子谱研究

王雅玲[1]，张鋆烨[1]，周怡昊[1]，李凡[1]，王植萱[1]，袁道福[1*]，王兴安[1]，杨学明[2,3]

[1]中国科学技术大学，安徽合肥，230026
[2]中国科学院大连化学物理研究所，辽宁大连，116023
[3]南方科技大学，广东深圳，518055

*Email: ydfu@ustc.edu.cn

过渡态的几何构型与量子态结构是全面理解反应动力学的关键。然而，化学反应过渡态具有寿命极短、浓度极低等特点，传统方法很难对其实现精准探测。基于负离子光电子谱的过渡态光谱技术可有效探测过渡态区域势能面，已广泛用于自由基、团簇及过渡态的精细量子态研究。高质量离子源、离子的有效冷却和高分辨光电子探测是获得量子态分辨光电子谱的重要实验前提。近期，我们成功搭建了一套结合电喷雾电离源、低温射频离子阱和高分辨光电子速度成像的实验装置。通过测量 Au^-在 480-535 nm 波长范围内的光电子影像，我们完成了实验装置的定标与成像探测分辨率优化。利用该装置，我们研究了次磷酸根负离子（$H_2PO_2^-$）光电子谱，获得了不同脱附激光波长下的影像。从高分辨光电子谱中清晰观测到 H_2PO_2自由基丰富的振动结构，这些振动结构为解析 H_2PO_2自由基的异构化反应过渡态和动力学提供了关键实验支撑。

关键词：电喷雾电离；低温离子阱；光电子成像；次磷酸根负离子

星际分子 C_2的高激发态：光谱特征与能级寿命

李娣[1,2]，马丽英[1,2]，殷彤晖[1,2]，蒋攀[1,2]，程敏[1,2]*，高蕻[1,2]*

[1] 中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街 2 号，100190
[2] 中国科学院大学，北京市海淀区中关村北一街 2 号，100049
*Email: chengmin@iccas.ac.cn, honggao2017@iccas.ac.cn

C_2分子广泛存在于各种宇宙环境中，其光激发与光解离过程对理解星际介质、彗星及行星大气的光化学演化具有重要意义。例如，C_2分子在紫外波段的$e^3\Pi_g$态解离已被证实是彗星彗发的绿色光消失的关键机制[1]，然而其在真空紫外（VUV）波段的解离路径仍缺乏实验观测支持。我们结合双光子共振四波混频技术与直流放电制备C_2的方法，在VUV波段观测到多个C_2分子的新跃迁带系[2][3][4]。最近，我们实验确认了C_2的$4^3\Delta_g$高激发态[5]，其光谱项值测定为83135.1 cm^{-1}，是迄今在实验上确定的C_2的最高电子态。此外，我们还在UV波段发现了一个新的吸收带，结合hole-burning实验，将其归属为$3^3\Pi_g$(v'=6)-$a^3\Pi_u$(v''=5)。

为深入理解 C_2 的高激发态性质，我们系统测量了 UV 与 VUV 区域多个电子态的振转能级寿命。测量结果显示：1、位于解离阈值附近的$3^3\Pi_g$、$4^3\Pi_g$态的寿命表现出明显的转动依赖性，且大多数能级的寿命短于高精度理论计算预测的辐射寿命；2、位于 VUV 区域的$1^3\Sigma_g^+$、$2^3\Sigma_g^-$态寿命具有显著的振转依赖性，寿命值从低转动能级的 60 ns 缩短到高转动能级的< 4.7 ns，预示这些电子态可能发生了预解离[6][7]；3、能量更高的$2(g)^3\Delta_g$、$3^3\Delta_g$、$4^3\Delta_g$态的振转能级均表现出较短寿命（<10 ns），与理论计算的辐射寿命定性吻合[8]。如此复杂的寿命特征表明 C_2 高激发态之间存在复杂的相互作用，亟需开展包含自旋-轨道与转动耦合的高精度理论计算。未来，我们将重点研究 C_2 在解离阈值以上的 UV 和 VUV 波段的光解离动力学，为天体化学中碳循环与分子演化过程提供关键实验依据。

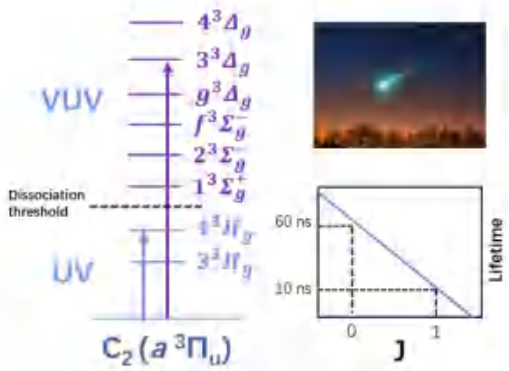


图1：C_2高激发态的电子态和寿命测量

关键词：C_2；泵浦-探测；真空紫外激光；能级寿命；预解离；

参考文献：

[1] Borsovszky, J.; Nauta, K.; Jiang, J, et al. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2021, 118(52):e2113315118
[2] Yin, T.; Ma, L.; Cheng, M.; Gao, H. J. Phys. Chem. Lett. 2022, 13(47):11008.
[3] Yin, T.; Ma, L.; Cheng, M.; Gao, H. J. Chem. Phys. 2023, 158:174304.
[4] Ma, L.; Yin, T.; Li, D.; Jiang, P.; Cheng, M.; Gao, H. J. Phys. Chem. A 2024, 128(6), 1074.
[5] Li, D.; Ma, L.; Yin, T.; Jiang, P.; Cheng, M.; Gao, H. Phys. Chem. Chem. Phys. 2025, 27, 15376-15384.
[6] Ma, L.; Li, D.; Jiang, P.; Cheng, M.; Gao, H. J. Phys. Chem. Lett. 2024, 15, 8620-8627.
[7] Ma, L.; Li, D.; Jiang, P.; Cheng, M.; Gao, H. J. Phys. Chem. A 2024, 128, 10413-10422.
[8] Li, D.; Ma, L.; Jiang, P.; Cheng, M.; Gao, H. Chin. J. Chem. Phys. 2025.

$C_3O_2^+$的电子振动光谱研究

李佑卿[1]，李振振[1]，陈旸[1,2*]，赵东锋[1,2*]

[1] 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心，安徽 合肥，230026

[2] 中国科学技术大学未来学院，安徽 合肥，230026
*Email: dzhao@ustc.edu.cn

$C_3O_2^+ \rightarrow C_2O^+ + CO$ 反应已在实验室模拟的星际冰演化实验中被定量探测到。$C_3O_2^+$在等离子体环境和星际空间中具有潜在重要性，可能是其间化学演化过程的关键中间体。

我们在 3.69-4.20 eV 能量范围内探测了 $C_3O_2^+$的电子振动光谱，这是对气相 $C_3O_2^+$的首次直接光谱探测。实验结果展现了丰富的振动结构，光谱中叠加的连续吸收背景提示高能区可能存在解离态或双光子过程。结合 LPDFT 理论方法，计算了 $C_3O_2^+$基态及若干低激发态的电子激发能、平衡构型和简谐振动频率，对其 $^2B_1$ 和 $^2A_1$ 基态进行了势能面扫描和成键分析，还用 MRCI 和 NEVPT2 方法计算了 $^2\Pi$ 激发态的 SOC。由于涉及复杂的电子-振动相互作用、自旋-轨道耦合以及多种振动模式或多个电子态的激发，导致谱图非常复杂，我们基于理论计算，对观察到的特征结构进行了初步分析。

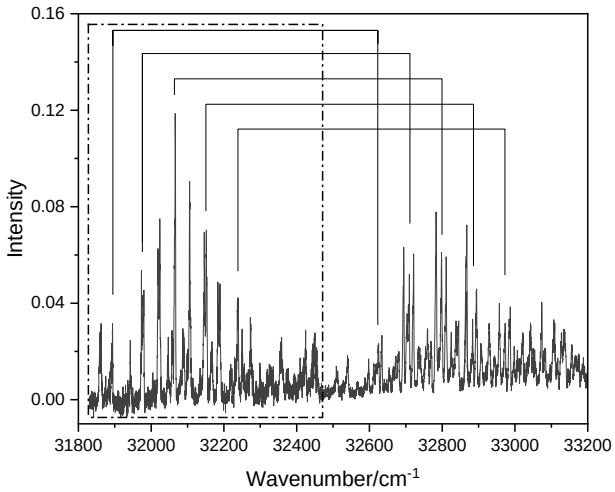


图 1：$C_3O_2^+$在 31800-33200 cm^{-1} 能量范围内的光解离谱

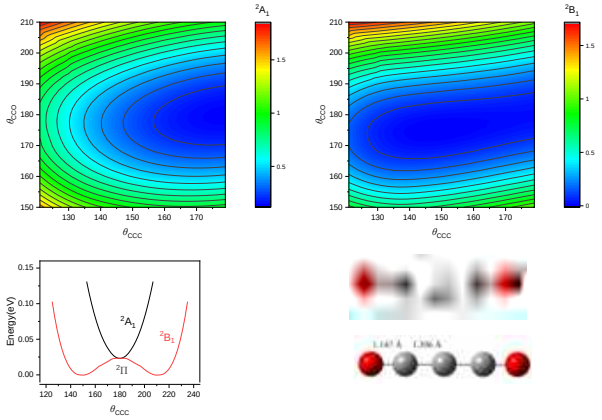


图2：计算的$C_3O_2^+$基态势能面和构型示意图

关键词：光解离谱；电子振动谱；碳氧团簇离子；自由基阳离子；成键分析

参考文献：

[1] Huntress, W. T.; Alien, M.; Delrtsky, M. *Nature*, 1991, 352: 316.

[2] Hennefarth, M. R.; Hermes, M. R.; Truhlar, D. G.; Gagliardi, L. *J. CHEM THEORY COMPUT*, 2023, 19: 3172.

A Common Origin, A Diverse Evolution: Environmental Impact on Protostellar Ice Composition

Jinzhi Lai[1], Minyi Lin[1], Chao Liu[1],*

[1]NAOC, 20A Datun Road, Chaoyang District, Beijing 100012, China

The chemical composition of interstellar ices, the precursors to planetary systems, profoundly influences the ultimate makeup and habitability of planets. Although the column densities of key ices (H_2O,CO_2, CO,CH_4, etc.) have been measured for individual Young Stellar Objects (YSOs), the global relationships between their abundances and the governing physicochemical mechanisms are not well understood.

In this work, we conduct a large-scale comprehensive study to systematically investigate these relationships. We consolidated decades of data from the literature and expanded the sample by re-analyzing spectra from the Spitzer/IRS and JWST/NIRSpec & MIRI public archives with a standardized pipeline. Our analysis reveals a strong, near-universal positive correlation between the column densities of major ice species, especially H_2O and CO_2, providing robust evidence for a co-formation mechanism on dust grain mantles. The key finding, however, is that the slope of this correlation—representing the molecular abundance ratio—is not constant. Instead, it is modulated by the local physical environment, including the envelope temperature and YSO mass.

Keywords: Astrochemistry; Interstellar Ices; Young Stellar Objects; Spitzer; JWST

References:

[1] Gibb, E. L.; Whittet, D. C. B.; Boogert, A. C. A.; Tielens, A. G. G. M. Astrophys. J. Suppl. Ser. 2004, 151, 35.

[2] Shimonishi, T.; Onaka, T.; Kato, D.; Sakon, I.; Ita, Y.; Kawamura, A.; Kaneda, H. Astron. Astrophys. 2010, 514, A12.

[3] Oliveira, J. M.; van Loon, J. Th.; Sloan, G. C.; Sewiło, M.; Kraemer, K. E.; Wood, P. R.; Indebetouw, R.; Filipović, M. D.; Crawford, E. J.; Wong, G. F.; Hora, J. L.; Meixner, M.; Robitaille, T. P.; Shiao, B.; Simon, J. D. Mon. Not. R. Astron. Soc. 2013, 428, 3001-3033.

[4] Ioppolo, S.; Sangiorgio, I.; Baratta, G. A.; Palumbo, M. E. Astron. Astrophys. 2013, 554, A34.

[5] Öberg, K. I.; Boogert, A. C. A.; Pontoppidan, K. M.; Blake, G. A.; Evans, N. J.; Lahuis, F.; van Dishoeck, E. F. Astrophys. J. 2008, 678, 1032.

[6] Pontoppidan, K. M.; Boogert, A. C. A.; Fraser, H. J.; van Dishoeck, E. F.; Blake, G. A.; Lahuis, F.; Öberg, K. I.; Evans II, N. J.; Salyk, C. Astrophys. J. 2008, 678, 1005.

[7] Boogert, A. C. A.; Pontoppidan, K. M.; Knez, C.; Lahuis, F.; Kessler-Silacci, J.; van Dishoeck, E. F.; et al. Astrophys. J. 2008, 678, 985.

[8] Gerakines, P. A.; Whittet, D. C. B.; Ehrenfreund, P.; Boogert, A. C. A.; Tielens, A. G. G. M.; Schutte, W. A.; Chiar, J. E.; van Dishoeck, E. F.; Prusti, T.; Helmich, F. P.; de Graauw, Th. Astrophys. J. 1999, 522, 357.

HONO 的 $S_1(\tilde{A}^1A'')$态光解动力学研究

张泽杰[1]，侯思婷[1]，陈琪[1]，谢长建[1,*]

[1] 西北大学现代物理研究所，中国陕西西安，710127
*Email: chjxie@nwu.edu.cn

亚硝酸（HONO）是边界层中重要的大气成分，其可由大气中的水蒸气、NO 和 NO_2 的氧化物反应而成。HONO 光解离后可以形成 OH 自由基，OH 自由基可以驱动大气中氧化反应消除大气对流层中的大部分污染物，因此 HONO 在大气化学中发挥着至关重要的作用。

由于 HONO 体系第一激发态全域势能面的缺失、理论模拟的吸收谱和实验结果差别较大且光谱吸收峰中对应振动模式归属指认不清楚的问题，本课题组在前期工作中，在高级别计算水平上构建了 HONO 基态和激发态的全域势能面，采用量子波包方法计算 A←X 跃迁的吸收光谱，并从理论上指认吸收谱峰所对应的振动模式的归属，阐释了 Feshbach-type 共振对其光解动力学的影响。

本工作基于课题组前期工作进一步完善了 HONO + hν → OH + NO 单解离通道全域势能面，并通过准经典轨迹计算了 *trans* 和 *cis* HONO 共振态 2^1 和 2^2 光解的产物的振转分布，计算结果与现有的实验计算数据吻合。我们新构建的绝热势能面将为进一步的深入研究和理解 HONO 光解的光解动力学提供坚实的基础。

关键词：光解动力学；HONO；准经典轨迹；Feshbach-type共振

参考文献：

[1] Li, C.; Hou, S.; Xie, C. *J. Chem. Theory Comput.* 2023, 19: 3063.

[2] Xiong, F.; Hou, S.; Li, J.; Wang, Z.; Xie, C. *J. Chem. Phys.* 2024, 161: 014305

[3] Chen, Q; Zhang, Z.; Xie, C. 2025 (In preparation)

分子云化学性质分析工具 PDFchem 及其应用：Orion A 中的碳原子丰度研究

蒋雪健 [1,*]，Thomas Bisbas [1]

[1] 之江实验室天文计算研究中心，浙江杭州市余杭区文一西路 2880 号，311100
*Email: jiangxuejian@zhejianglab.org

星际介质中的紫外辐射场可以决定简单原子分子的物理化学性质，相关的机制研究对理解分子云演化和恒星形成有重要的意义。我们发展的 PDFchem 天体化学诊断工具，可以结合分子氢的柱密度数据模拟简单分子原子的丰度和辐射转移过程。在本工作中，我们针对 Orion A 巨分子云进行了 C^+, C, CO，HCO+ 等高丰度的简单星际分子的丰度和辐射模拟。为了约束模拟结果，我们搜集了分子谱线观测数据 ^{12}CO(J=1-0) ，[C I] 、[C II] 等。在特定的金属丰度和宇宙线电离率简化假设下，我们生成了紫外辐射场的仿真图像（分辨率为 0.25 pc），发现其分布与 Orion A 中年轻星的空间分布有紧密耦合（图 1 左）。

另外，对仿真图像的像素进行了 C^+, C, CO 等丰度与氢柱密度的二元统计，结果表明我们对 C 原子的丰度估计与前人的观测计算数据吻合较好。相较于过往研究建议的在光致离解区（PDR）中 C 原子分布于较小的氢柱密度范围，我们的结果建议 C 原子在分子云的较大氢柱密度范围内（$N_H = 10^{21.5}$ — $10^{22.5}$ cm^{-2}）都可以保持较高的相对丰度（$\geq 10^{-4.5}$，图 1 右）。在对氢分子的质量计算中，我们建议结合 CO 和 [C I] 、[C II] 观测数据，会得到更加准确的结果。

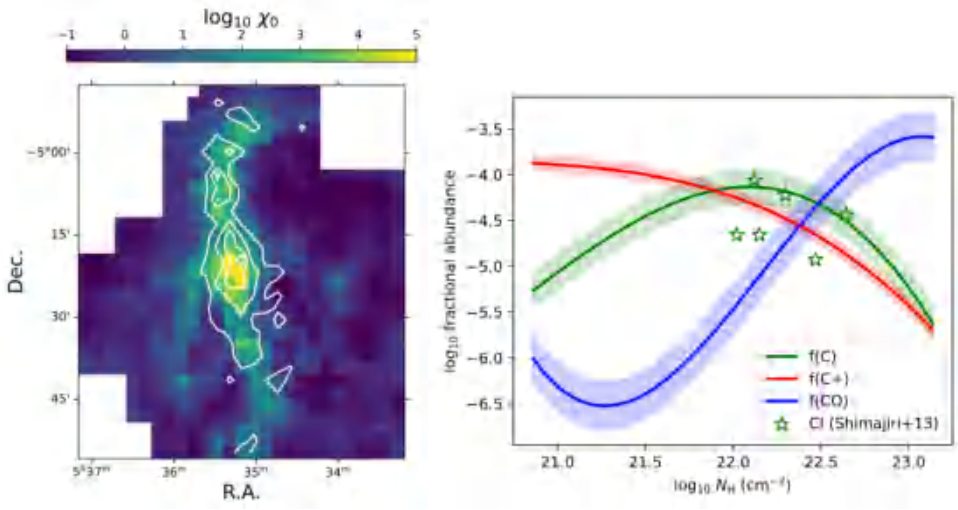


图1：*左：* Orion A 分子云中紫外辐射场强度的仿真数据（白色等高线为年轻星 YSO 的分布密度）。*右：* 本工作给出的 Orion A 中 C^+, C, CO 丰度随氢柱密度的变化（浅色带为 1 σ 误差）。绿色星型符号为基于 [CI] 观测数据的结果。

关键词：天体化学；分子谱线；射电天文；分子云；星际介质

参考文献：

[1] Bisbas, T. G., van Dishoeck, E. F., Hu, C. Y., et al. 2023, *MNRAS*, 519, 1, 729.

[2] Jiao, S., Lin, Y., Shui, X., et al. 2022, *Science China Physics, Mechanics, and Astronomy*, 65, 9, 299511

$C_{60}H^+$寻踪

胡懿[1]，张泳[1,*]

[1] 中山大学物理与天文学院，广东省珠海市香洲区唐家湾大学路 2 号，519082
* zhangyong5@mail.sysu.edu.cn

C_{60} 是碳元素中对称性最高的单质，在宇宙环境中有着特殊的稳定性，被认为广泛分布于星际空间，C_{60} 及其衍生物也可能是星际弥散带（DIB）的载体[1]。得益于 Spitzer 卫星的发射，人们第一次在行星状星云 Tc 1 中勘测到确切的 C_{60} 特征谱线[2]，此后，在更多的天体环境中探测到了 C_{60} 的踪迹[3][4]。C_{60} 与宇宙中最基本的元素 H 的相互反应，形成的氢化富勒烯是所有衍生物中存在可能性最高的。氢化富勒烯的异构体数量众多，从最简单的 $C_{60}H^+$分子作为研究切入点是一个可行的方案，$C_{60}H^+$红外光谱在 6-8 μm 波段特征性较差，而 $C_{60}H^+$中的 C-H 特征峰为 SP^3 杂化，频率有别于多环芳烃（PAH）中常见的 SP 与 SP^2 杂化的 C-H 键。因此，其 3.561 μm 处的 C-H 振动特征峰，可成为 $C_{60}H^+$存在的关键判据[5]。本工作通过对比部分已探明的 C_{60} 源的天文环境中的 3.5 μm 处特征峰，对 $C_{60}H^+$的存在进行了探索。同时，作为氢化反应的基本单元，为后续多位点的氢化富勒烯的种类和反应机理的研究提供了思路。

关键词：富勒烯；氢化富勒烯；碳氢键振动峰；红外光谱

参考文献：

[1] Kroto H W, Heath J R, Obrien S C, et a1. C60: Buckminsterfullerene. *Nature*, 1985, 318: 162–163

[2] Cami J, Jeronimo B S, Peeters E, et a1. Detection of C60 and C70 in a young planetary nebula. *Science*, 2010, 329: 1180–1182

[3] Sellgren K, Uchida K I, Werner M W. The 15–20 μm Spitzer spectra of interstellar emission features in NGC 7023. *Astrophys J*, 2007, 659: 1338–1351

[4] Zhang Y, Kwok S. Detection of C60 in the protoplanetary nebula IRAS 01005+7910. *Astrophys J*, 2011, 730: 126–130

[5] L. Finazzi, V. J. Esposito, J. Palotás, J. Martens, E. Peeters, J. Cami, G. Berden, and J. Oomens, *Astrophys. J.* 971, 168 (2024).

线形碳链 HC_4O^+的电子光谱研究

李振振[1]，李佑卿[1]，朱波星[1]，陈旸[1,2*]，赵东锋[1,2*]

[1] 中国科学技术大学化学物理系，微尺度物质科学国家研究中心，安徽 合肥，230026

[2] 合肥国家实验室，安徽 合肥，230088

*Email: dzhao@ustc.edu.cn

研究线形碳链 HC_4O^+的电子结构等信息，对于理解 HC_nO^+随着碳原子数的变化规律具有重要意义。首次实验记录了线形 HC_4O^+在 300 ~ 405 nm 范围的电子光谱，获得了若干低电子态结构信息。基于线性电子对密度泛函理论(LPDFT)计算结果，确定了该光谱归属于线形 $C_{\infty v}$ 结构的 HC_4O^+的 $^3\Sigma^-$−$^3\Sigma^-$和 $^1\Delta$−$^1\Delta$ 跃迁。基于 Franck−Condon 跃迁的理论光谱与实验光谱对比分析，确定了 $^3\Sigma^-$和 $^1\Delta$ 电子激发态的 ν_2、ν_4 和 ν_5 等三个振动模式的实验频率。基于波函数分析，从分子轨道方面解释了电子跃迁的来源以及构型变化的本质原因。通过对键级和单电子分布的分析，深入地理解了 HC_4O^+的成键规律。此外，我们通过 LPDFT 计算了若干线形 HC_nO^+的 Σ−Σ 跃迁，获得了相应的理论电子激发能，并进一步推测了其在弥散星际介质中的柱密度上限，从而为后续的实验室研究和天文观测提供了依据。

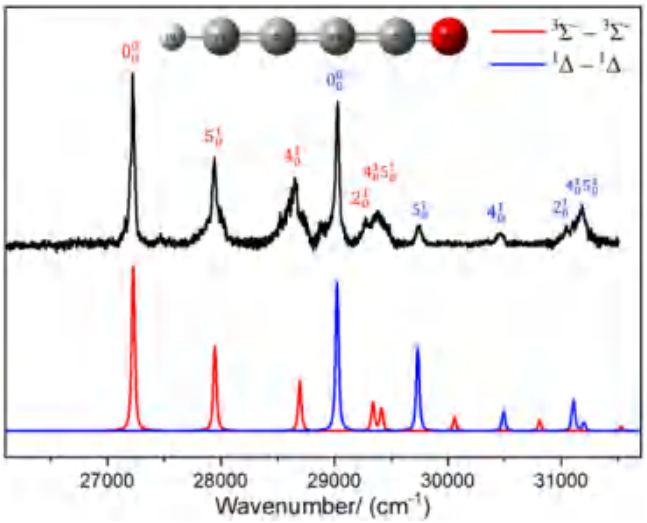


图 1：HC_4O^+在 26000 ~ 31500 cm^{-1} 范围内的电子跃迁光谱

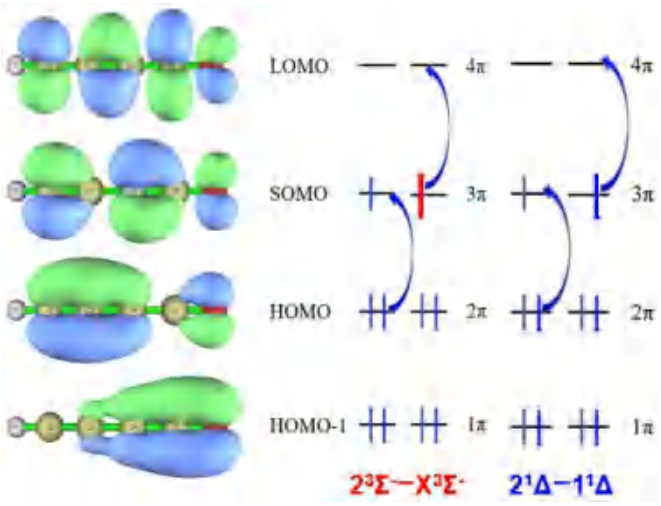


图2：HC_4O^+的分子轨道

关键词：星际分子；碳链自由基；气相电子光谱；多组态电子对密度泛函理论

参考文献：

[1] Cerniocharo, J, Marcelino, N, Agundez, M, et al. A & A. 2020, 642: L17.

[2] Hennefarth, M. R.; Hermes, M. R.; Truhlar, D. G. et al. J. Chem. Theory Comput. 2023, 19(11): 3172-3183.

Characterization of Quasiparticle Lifetime in Superconducting Kinetic Inductance Detectors for Astronomical Observation

Wei Geng[1,2], J. Hu[1], Q. Zhi[1], J. Li[1], S.C. Shi[1,*]

[1]Purple Mountain Observatory, CAS, Nanjing, 210023, China
[2]University of Science and Technology of China, Hefei, 230026, China
*Email: scshi@pmo.ac.cn

Kinetic Inductance Detectors (KIDs) are broadband, low-noise superconducting detectors that offer simple fabrication and excellent scalability to large-format arrays. They are now widely deployed in terahertz (THz) instruments for continuum imaging and low-resolution spectroscopic observations. A KID functions as a superconducting resonator. When a photon with energy $E>2\triangle$ ($\triangle$is the superconducting energy gap) is absorbed, it breaks Cooper pairs and creates quasiparticles. This changes the resonator's kinetic inductance and shifts its resonance frequency. By tracking this frequency shift, the energy of the absorbed photon can be inferred. Afterward, quasiparticles recombine back into Cooper pairs on a characteristic timescale known as the quasiparticle lifetime. This parameter is crucial, because in the THz regime the detector sensitivity scales linearly with the quasiparticle lifetime.

In this work, we performed a systematic measurement of quasiparticle lifetime across the resonator bandwidth by illuminating the resonator with optical pulses and observing the recovery of the resonance response. We observed a clear frequency dependence: the lifetime reaches its maximum exactly at the resonance frequency. We further found that the readout power has little influence on the quasiparticle lifetime, whereas temperature plays the dominant role—the lifetime increases with temperature initially and then decreases as the temperature continues to rise. Such insight into quasiparticle dynamics not only enables further optimization of detector performance, but also deepens our understanding of quasiparticle behavior and recombination mechanisms in superconductors.

Keywords：KID，quasiparticle lifetime，terahertz (THz) detector

References：

[1] Day, PK.; LeDuc, HG.; Mazin, BA.et al Nature. 2003 ;425(6960):817-21.
[2] Hu, J.; Matin, JM.; Nicaise, P. et al Supercond. Sci. Technol.2024 37 055014.
[3] de Rooij, S.A.H.; Fermin, R.; Kouwenhoven, K. et al Nat Commun 2025 16, 8465.

FAST Search for Circumstellar Atomic Hydrogen in Planetary Nebulae

Junyang Liu[1], Yong Zhang [1,2,*], Zhuang Zhang[1]

[1]School of Physics and Astronomy, Sun Yat-sen University, 2 Daxue Road, Tangjia, Zhuhai 519082, Guangdong, China

[2]CSST Science Center for the Guangdong-Hongkong-Macau Greater Bay Area, Sun Yat-Sen University, Zhuhai 519082, Guangdong, China

*Email: zhangyong5@mail.sysu.edu.cn

Atomic hydrogen (HI), a single proton plus electron, emits 21 cm radiation via hyperfine transition. As a key chemical tracer linking stellar evolution to Planetary Nebulae (PNe) chemistry, its abundance, ionization state, and distribution directly reflect chemical enrichment and elemental cycling in late-stage stellar evolution. However, detecting circumstellar HI in PNe is remarkably challenging - the main hurdle lies in omnipresent HI emission from the interstellar medium (ISM). One effective approach to address this issue is to select PNe with velocities that are significantly different from those of the local ISM. In this work, we use the Five-hundred-meter Aperture Spherical radio Telescope (FAST) to search for circumstellar HI in 15 PNe, whose velocities are distinct relative to that of the local ISM. Our observations result in the detection of circumstellar HI absorption in PN M 3-35 (**Fig. 1**), and tentative absorption features in J 320, NGC 7094, NGC 6210, and H 4-1. Based on these detections, we estimate the HI masses of these five PNe to range from 0.005 to 1.94 $M_{\odot}$. The HI emission lines in Abell 24 and Hen 2-459 exhibit a blue peak relative to their systemic velocities (see **Fig. 1**). This phenomenon might be partly attributed to the interaction between the PN moving toward us and the ambient ISM. For those without HI detection, we estimate the upper limits of their HI masses. Collectively, our observations identify a subset of PNe hosting detectable circumstellar HI, and this finding implies that such PNe may serve as favorable chemical environments for both the chemical evolution of the nebular medium and the formation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) [1], [2],[3].

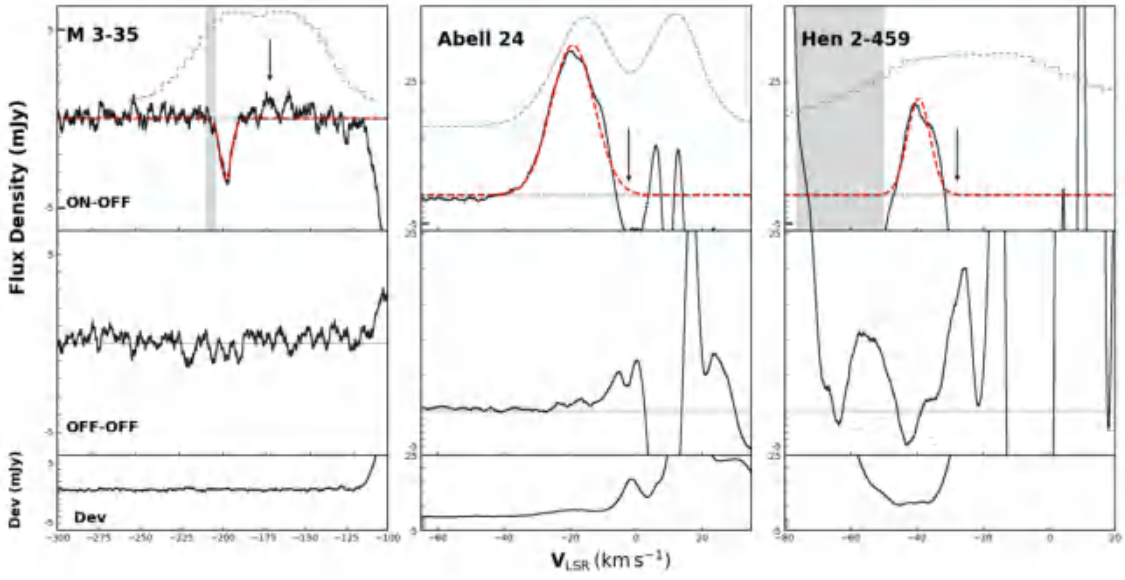


Fig. 1 Spectra of HI-existing PNe (M 3-35, Abell 24, Hen 2-459). Upper panel: ‘ON-OFF’

difference spectrum (on-source M 01 minus average off-source spectra of M 02-M 07). Middle panel: 'OFF-OFF' difference spectrum (average of north/south off-source beams minus east/west off-source beams). Lower panel: Deviation of individual off-source beam spectra. The arrow indicates the PN's systemic velocity. The binned dashed curve shows the [NII] line profile[4]. The gray shaded region denotes the velocity range and width of CO emission[5]. The red dashed curve is a fit to the detected HI absorption line.

Keywords：Circumstellar envelopes --- Stellar mass loss --- Planetary nebulae --- Interstellar atomic gas --- Single-dish antennas

References：

[1] A. M. Thomas, M. Lucas, T. Yang, R. I. Kaiser, L. Fuentes, D. Belisario-Lara, A. M. Mebel. *ChemPhysChem.* 2017, 18: 1971.

[2] Mennella, V. EAS Publications Series(EDP). 2011, 46: 393-398.

[3] Boschman L, Cazaux S, Spaans M, et al. A&A. 2015, 579: A72.

[4] Guzman-Ramirez, L., Gómez-Ruíz, A. I., Boffin, H. M. J., et al. A&A. 2018, 618: A91.

[5] López, J. A., Richer, M. G., García-Díaz, M. T., et al. RMxAA. 2012, 48:3.

丙烯腈-水团簇结构与动力学的微波光谱研究

梁悦[1]，张婷[2]，…，李卫星[1,*]

[1] 复旦大学化学系，中国上海，200438
*Email: weixingli@fudan.edu.cn

在天体化学研究中，星际分子在尘埃冰幔表面的吸附与反应是分子演化的重要路径。丙烯腈作为典型的含氰基不饱和烯烃，是合成复杂有机分子及生命前体物质的关键前驱体，在星际化学演化中具有特殊意义。[1-2] 本研究利用自主研发的啁啾脉冲−傅里叶变换微波光谱仪，结合高水平量子化学计算，系统研究了丙烯腈−水分子团簇的精确结构及其反应动力学。实验成功观测到丙烯腈与水形成的系列团簇结构（从二聚体逐步水合至七聚体），其中，在丙烯腈三水团簇中观测到水分子在丙烯腈平面上大振幅运动导致的量子隧穿效应，对应的精细光谱裂分为 $0^+/0^-$两个振动态。此外，本研究还观察到当单个水分子插入丙烯腈二聚体时，体系仍保持平面结构；而当插入两个水分子后，则诱导丙烯腈二聚体发生从平面到立体构型的结构转变。这些发现从分子层次揭示了水分子调控有机分子构型演化的微观机制，为理解富水星际环境中前体物质的活化及复杂有机分子的形成机制提供了重要的实验依据和理论模型。

关键词：丙烯腈，微溶剂化，转动光谱

参考文献：

[1] Hudson, R. L.; Moore, M. H., *Icarus* 2004, 172 (2), 466-478.

[2] Camilla, C.; Annalisa, V.; Assimo, M.; Sergio, M.; Pantea F.; Wolf. D. G.; Sonia M. *J. Phys. Chem. A.* 2015, 119: 11674.

宽带微波光谱研究 $SO_3(H_2S)$在水团簇中的反应路径

张淑瑶[1]，洪婧羚[1]李卫星[1,*]，周鸣飞[1,*]

[1]复旦大学化学系，中国上海，200438
*Email: weixingli@fudan.edu.cn

摘要正文：星际与行星化学致力于揭示宇宙环境中分子的形成路径与演化规律。二氧化硫（SO_2）等硫氧化物在木卫一等天体的火山大气及星际介质中广泛存在，其氧化产物 SO_3与硫化氢（H_2S）在水分子的参与下，可反应生成硫代硫酸（$H_2S_2O_3$）等重要硫氧酸。此类分子被视为行星大气气溶胶与冰卫星海洋中潜在的生命前驱物质，但其在宇宙环境中的具体形成机制尚不明确。团簇是探究分子间微观作用的理想模型，而高分辨微波光谱是测定气相分子结构、指认星际分子的关键工具。本工作使用自主研发的啁啾脉冲-傅里叶变换微波光谱装置结合量子化学理论计算，系统探索了 $SO_3 + H_2S + (H_2O)_n$ (n=0,1) 的团簇及反应势能面，揭示了水分子对反应路径的高效催化作用。实验结果表明，该反应在微观上可自发进行，并生成稳定的 $H_2S_2O_3$ $(H_2O)_n$团簇。本研究首次从理论上明确了该三元团簇反应在天体环境中的可行性，所预测的团簇结构及其光谱跃迁信息对理解太阳系天体的硫循环、生命起源前的化学演化具有重要的科学意义。

关键词：微波光谱；分子团簇；微溶剂化

参考文献：

[1] Lee, Z. R.; Zhang, S.; Flores, L. A.; Dixon, D. A. Predicting the Formation of Sulfur-Based Bronsted Acids from the Reactions of SO_3 with H_2O and H_2S. *J. Phys. Chem. A* 2019, 123, 10169–10183.

[2] Zhang, H.; Wang, W.; Fan, L.; Li, J.; Ren, Y.; Li, H.; Gao, R.; Xu, Y. The Role of Sulfur Cycle in New Particle Formation: Cycloaddition Reaction of SO_3 to H_2S. *J. Environ. Sci.* **2025**, 148, 489–501.

新型高频啁啾脉冲微波光谱仪的建设

高志文[1]，李卫星[1,*]，王冠军[1]，周鸣飞[1,*]

[1]复旦大学化学系，上海市杨浦区淞沪路2005号，200438

*Email: weixingli@fudan.edu.cn; mfzhou@fudan.edu.cn

射电天文学的发展使得微波光谱仪对于天体化学意义非凡。至今已在星际空间中发现了超过 300 种星际分子，其中超过 80%是通过微波光谱发现并识别。然而，传统技术在高频段面临灵敏度和扫描速度的瓶颈，限制了我们对更复杂星际分子的搜寻。在此我们报道一种新型高频啁啾脉冲微波光谱仪的建设工作，该仪器通过产生覆盖 18-33 GHz 的啁啾脉冲微波，实现了对数十吉赫兹频谱的微秒级快速采集。通过配合脉冲放电以及超声分子束技术，可以实现对高反应活性物种的实时生成与原位检测。其高频探测能力，完美匹配 ALMA 等现代射电望远镜的观测窗口。

关键词：微波光谱；星际分子

Rotational Spectroscopy of Ethylene Trithiocarbonate

Yang Ma, and Gang Feng*

[1]School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University, Daxuecheng South Rd. 55, 401331 Chongqing, China.
*E-mail: fengg@cqu.edu.cn

Ethylene trithiocarbonate belongs to the class of polysulfone molecules and may serve as one of the "reservoir" forms of interstellar sulfur. Studying its rotational spectrum can provide reliable radio spectral references for potentially detecting this sulfur-containing organic molecule in interstellar. This study employed cavity-based Fourier transform microwave (FTMW) spectroscopy combined with quantum chemical calculations to investigate the molecular configuration of ethylene trithiocarbonate (EETC). In the gas phase, a single conformation of the EETC molecule was observed. Analysis of the experimental spectrum accurately determined the rotational constants and centrifugal distortion constants. The molecular structure of EETC was derived from the experimentally obtained spectral data. The precise spectral parameters of ethylene trithiocarbonate provided in this study will facilitate the interstellar detection of this species.

Keywords： Microwave spectroscopy; molecular line; interstellar molecules; sulfur molecule;

宽带微波光谱研究苯甲腈-水团簇结构及其溶剂化效应

张婷[1]，李卫星[1,*]，周鸣飞[1,*]

[1]复旦大学化学系，中国上海，200438
*Email: weixingli@fudan.edu.cn

摘要正文：星际化学主要研究分子云、彗星、行星、宇宙尘埃等中的化学物质，旨在解释分子在宇宙中是如何形成、演化并相互作用的。苯甲腈（BZN）是星际介质中首个被观测到的星际苯衍生物，已在多个星际与恒星周围环境中被观测到。作为最简单的含氰基芳香分子，腈基可作为质子受体，能够与水、醇类等质子供体高效形成氢键，其水合团簇极易形成，有望存在于星际介质中。星际分子的探索及反应机理的研究是星际化学的核心，微波转动光谱技术是测定气相分子转动跃迁的有效方法，具有高的光谱分辨率，能够获得精确的结构表征，许多星际分子都是通过微波光谱指认的。此外，BZN 的结构和功能受溶剂化效应的影响，其溶剂化微观作用机制尚不明确，团簇可作为宏观体系的理想模型在分子水平上揭示其溶剂化效应的底层机制。本工作使用自主研发的啁啾脉冲-傅里叶变换微波光谱装置结合量子化学理论计算，系统研究了苯甲腈水合团簇的高分辨转动光谱、精确几何结构及内部动力学。首先，测量了 BZN-$(H_2O)_{2\text{-}4}$ 及其同位素取代物种在 2-8 GHz 频段的微波光谱，发现其水合团簇结构中存在分子的大幅度隧穿现象。本工作研究结果揭示了苯甲腈此类星际分子溶剂化的微观过程，为研究分子溶剂化过程提供了基础理论依据，同时该跃迁信息也可用于天文搜索表征 BZN-水团簇，为理解宇宙演变和生命起源提供重要的科学依据。

关键词：微波光谱；分子团簇；微溶剂化

参考文献：

[1] C. Puzzarini. Grand Challenges in Astrochemistry. Front. Astron. *Space Sci.* 2020, 7.

[2] Klemperer W. Interstellar chemistry. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2006, 103: 12232.

[3] Sonia M, Daniela C, Walther C, Paolo G. F. *J. Chem. Phys.* 1999, 111: 3874-3879.

氨基酸的氢同位素分馏效应

托力哈娜依·吐尔洪江[1]，谢豪[1,*]

[1]南京大学，南京市栖霞区仙林大道 163 号，210023
*Email: hxie@nju.edu.cn

在碳质球粒陨石中存在多种能够构成生命物质的氨基酸，这些氨基酸系太阳系形成前以及形成早期的化学合成的产物，在太阳系前生命化学合成乃至生命起源中扮演了重要的角色。然而，这些氨基酸形成过程中的化学机理，形成环境和水蚀变作用的影响尚不明确。前人对于碳质球粒陨石以及小行星返回样品中的氨基酸进行了碳、氮、氢稳定同位素分析，其结果对于解答上述问题提供关键信息。然而，目前较为缺乏对于氢同位素数据的解读，其受到来源、后期改造作用的影响尚未清晰。氨基酸部分氢原子可以在较常见的条件下发生和水的同位素交换，改造同位素值。因此，研究氨基酸不同点位上的氢同位素的平衡分馏效应非常关键。%但该领域存在空白。我们的结果既可以填补这个空白，也可以计算出氨基酸于太阳系形成时的大致位置。

我们利用量子化学理论方法对于氨基酸的氢同位素平衡分馏进行计算。基于密度泛函理论（B3LYP/6-311G**）优化分子结构，计算得到振动频率，利用 Bigeleisen－Mayer 定理计算得到氨基酸不同点位上的简化配分函数比值，再算出氨基酸的全分子平均平衡分馏值。我们对于包括甘氨酸在内的 20 种氨基酸进行计算，结合水的计算结果得到氨基酸-水（气态）之间的分馏值，并结合 Horibe 等人的水（气态）-水（液态）的实验结果获得 0-10℃内氨基酸和液态水之间的平衡分馏值。

我们的计算结果显示，在温度为 0℃，氨基酸中心碳上直连氢和水的分馏（1000lnα）数值区间在[-338.766775, -106.210173]，最大值代表的氨基酸是 D-天冬氨酸，最小值代表的是 D-脯氨酸；全分子的平衡分馏数值区间在[-416.883000, 767.748788]，最大数值代表的是 D-色氨酸，最小数值代表的是 D-半胱氨酸。

利用这些数据我们可以进一步计算氨基酸形成时的水环境，推测其在太阳系中的大致位置，可以为我们分析氨基酸的形成与演化过程和环境条件提供基础，并加深我们对太阳系前生命化学合成和生命起源的了解。

关键词：氨基酸；氢同位素；碳质球粒陨石;前生命化学

参考文献：

[1] Liu, Q., Tossell, J. A., & Liu, Y. (2010). *Geochimica et Cosmochimica Acta*, *74*(23), 6965–6983.

[2] Horita, J., & Wesolowski, D. J. (1994). *Geochimica et Cosmochimica Acta*, *58*(16), 3425–3437.

[3] Rustad, J. R. (2009). *Organic Geochemistry*, *40*(6), 720–723.

基于Δ-ML 的神经网络透热化方法构建高精度耦合势能面

侯思婷[1]，谢长建[1,*]

[1] 西北大学现代物理研究所，中国陕西西安，710127
*Email: chjxie@nwu.edu.cn

分子的非绝热反应广泛存在于大气化学、星际化学中。而要深入理解分子的非绝热反应过程，构建相关体系高精度的透热势能面是其中的关键之一。但是，目前构建实际分子体系的透热势能面非常困难，在精度和效率方面很难兼得。为此，最近我们提出了一种仅基于分子体系绝热能量的神经网络方法来构建小分子耦合势能面的方法[1]，将其应用到了 H_2O、NH_3、NaH_2 等实际气相小分子体系，在保证耦合势能面具有量子动力学精度的同时，显著提升了计算效率（20 倍以上）。

但是势能面的精度很大程度还取决于电子结构计算的水平，考虑电子相关效应的高水平从头计算方法（如多组态的二级微扰理论 CASPT2 和多参考组态相互作用 MRCI 方法）虽然精度高，但是其计算困难且耗时。而低水平方法（如完全活性自洽场方法 CASSCF）尽管计算高效，但精度难以满足量子动力学计算。

为了提高计算效率，同时得到量子动力学精度的透热势能矩阵。我们进一步基于 Δ-机器学习（Δ-ML）的方法，发展了神经网络透热化方法。以 NH_3(X/A)的光解和 $Na(3p) + H_2 \rightarrow NaH(\Sigma^+) + H$ 非绝热反应为例，利用低水平小基组的大量数据，并加以少量高水平数据点，成功构建了体系高精度透热势能面。进一步的量子动力学计算表明，该方法构建的势能面与已有理论结果高度一致，验证了Δ-ML 透热化新方法的精度。

关键词：神经网络；Δ−机器学习；量子动力学精度；透热势能矩阵

参考文献：

[1] Li, C.; Hou, S.; Xie, C. *J. Chem. Theory Comput.* 2023, 19: 3063.
[2] Hou, S.; Wang, Z.; Xie, C. *J. Phys. Chem. A*, 2024, 128: 7046.
[3] Li, C.; Hou, S.; Wang, Z.; Xie, C. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023, 25 :18797.
[4] Hou, S.; Zhang, Z.; Xie, C. (In preparation)

基于高斯递推算法的光电离（脱附）截面计算程序发展

李东阳[1,2]，张凤[1,2*]，段赛[3]

[1] 中国科学技术大学未来技术学院，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
[2] 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
[3] 复旦大学化学系，上海市杨浦区淞沪路 2005 号，200438
*Email: feng2011@ustc.edu.cn

为准确预测星际介质（Interstellar Medium, ISM）中有机物种的相对丰度，必须深入理解其生成和湮灭机制。中性分子的光电离及阴离子的光脱附作为星际环境中重要的物种湮灭途径，其速率的精确求解对构建可靠的星际化学模型尤为关键。光电离截面或光脱附截面反映了相应过程发生的概率，即电子在光子作用下从束缚态跃迁至连续态，这一物理量可用于评估物种的光稳定性，也是计算光电离或光脱附速率的核心依据。

在偶极近似下，光电离（脱附）截面正比于从初始轨道电离所产生的跃迁矩的平方。该跃迁矩的初态为未电离的 N 电子体系波函数，末态则包括 N-1 电子离子实波函数与连续态的光电子波函数。因此，精确计算光电离（脱附）截面的关键在于对初始体系、离子实以及光电子波函数的准确描述。诸如 DFT、EOM-CCSD 等量子化学方法可较好地处理初态和离子实的波函数，然而传统处理光电子波函数时常采用分波展开方法，需将连续态展开为无穷级数并进行截断，这类方法不仅受限于精度，还因逐项计算而显著增加计算成本，尤其在高能区和复杂化学体系（如星际介质中多样的分子与离子）中适用性受限。

为解决分波展开方法在精度与效率上的瓶颈，本研究基于 Obara－Saika 提出的高斯型函数递推关系，将完整的光电子波函数直接引入跃迁矩的计算中，实现了光电离（脱附）截面的解析求解。以苯甲基负离子（$C_7H_7^-$）为例，我们展示了该方法在光脱附截面计算中的显著改进：在维持高精度的同时大幅提升计算效率。本研究发展的计算工具有望为星际化学中光电离速率的准确估算提供支持，进而促进对星际介质化学演化的精确模拟。

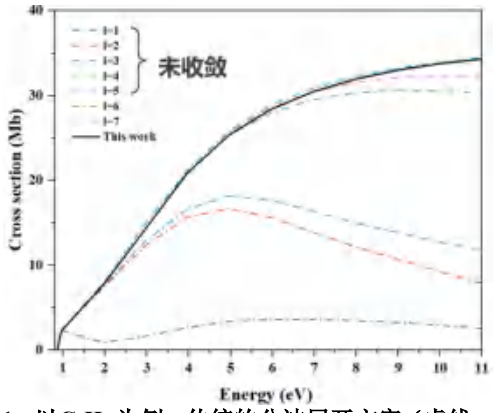


图1：以$C_7H_7^-$为例，传统的分波展开方案（虚线，l表示纳入考量的最大展开阶数）及本方案（实线）计算到的光脱附截面（单位Mb）随能量（单位eV）的变化曲线

表1：以$C_7H_7^-$为例，传统的分波展开方案及本方案计算光脱附截面的CPU耗时（单位s）

Computing Method	CPU time/s
This work	297
l=1	425
l=2	671
l=3	1067
l=4	1483
l=5	2360
l=6	3079

关键词：真空紫外光化学；光电离（脱附）截面；高斯递推算法

参考文献：

[1] Hrodmarsson, H. R.; van Dishoeck, E. F. Astronomy & Astrophysics 2023, 675.
[2] Ruaud, M., Wakelam, V., & Hersant, F. 2016, MNRAS, 459, 3756

分子取向激发及量子态调控

喻萌翌[1]，吕亚男[1]，程存峰[1,*]，胡水明[1,*]

[1] 合肥微尺度物质科学国家研究中心，中国科学技术大学，合肥 230026，中国
*cfcheng@ustc.edu.cn, smhu@ustc.edu.cn

分子具有丰富的振动、转动自由度和对称性，为振-转跃迁精密光谱、量子态分辨的化学动力学等研究领域提供了新的思路和研究途径。受限于较弱的振-转跃迁截面以及精密红外光源的缺乏，分子的取向及量子态调控面临着较大的挑战。在分子振-转跃迁三能级体系中，通过对激光频率、功率、偏振的精密调控，能够实现目标量子态的选择性激发和取向调控。我们自主研制了波长覆盖 2.0-4.7um 的精密连续光参量振荡放大器(cw-OPO)。利用激光频率、相位控制技术，我们在分子束中实现了分子的内态调控。通过调控激光的偏振及作用时间，能够实现好于 80%的振-转量子态布居转移效率，通过调控耦合激光的光强，能够实现分子空间取向的精确调控。该光学调控方法为研究特定取向分子的碰撞和反应过程提供了新的分子制备方法，在冷碰撞动力学、立体动力学、和量子精密测量等领域具有广泛的应用潜力。

关键词：振-转跃迁；取向激发；量子态调控；

参考文献：

[1] Stahovich J T, Rowe B A, Huennekens J, et al. *Physical Review Letters*, 2024, 133(26): 263601.

[2] Koch C P, Lemeshko M, Sugny D. *Reviews of Modern Physics*, 2019, 91(3): 035005.

[3] Liu Q H, Zhang H, Wen L, et al.. T*he Journal of Physical Chemistry Letters*, 2024, 15(39): 9926-9931.

Deciphering the Photochemistry of Thionylimide (HNSO): Isomers and Tunneling-Controlled Reactions

Xin Jiang[1], Yiding Fan[1], Yuyang Li[1], Lina Wang[1,*], Xiaoqing Zeng[1,*]

[1]Department of Chemistry, Shanghai Key Laboratory of Molecular Catalysis and Innovative Materials, Fudan University, Shanghai 200433, China

*Email: lina_wang@fudan.edu.cn；xqzeng@fudan.edu.cn

Thionylimide (HNSO) and its isomer thionitrous acid (HSNO) are important intermediates in atmospheric chemistry and biology, respectively. However, the chemical network linking HNSO and HSNO is not fully understood due to the absence of some high-energy isomers. Herein, we report the identification of *trans*-HNSO and *cis*-HONS during the photochemistry of *cis*-HNSO in a solid Ne matrix at 3 K. The characterization of both species with matrix-isolation IR spectroscopy is supported by D- and ^{15}N-isotope labeling experiments and quantum chemical calculations at the CCSD(T)-F12B/VTZ-F12 level of theory using configuration-selective vibrational configuration interaction theory (VCI). Interestingly, spontaneous reactions via quantum mechanical tunneling (QMT) have been observed at 3 K for the *trans* → *cis* conformational rotation in HNSO and HOSN, as well as for the 1,3-hydrogen migration in *cis*-HONS (→ *cis*-HSNO). The QMT mechanism by the hydrogen atom is consistent with the kinetic isotope effects (KIEs) and the multidimensional instanton theory calculations.

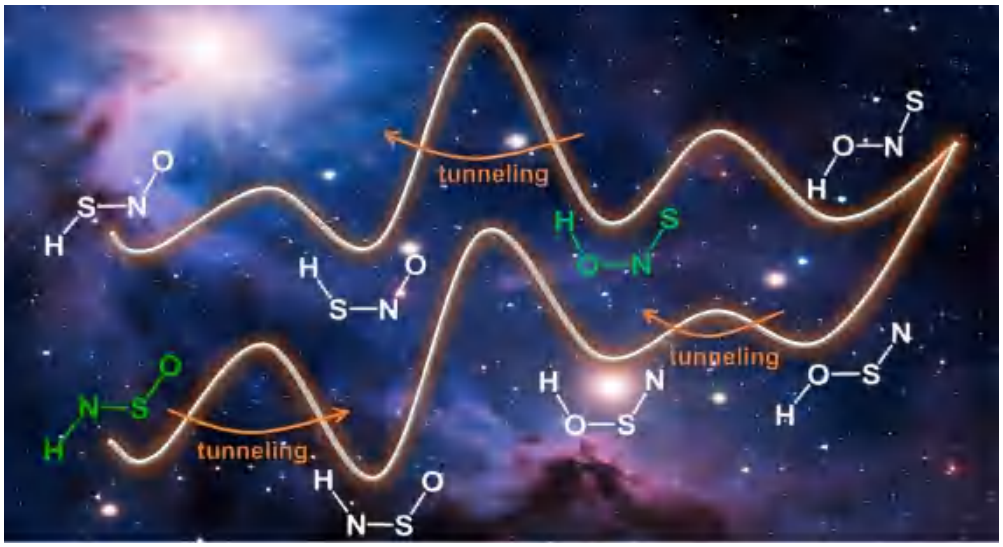


Fig. 1 The network of the [H, N, S, O] isomers

Keywords: HNSO isomers，quantum tunneling，matrix isolation

References：

[1] Jiang, X.; Fan, Y.; Huang, L.; Guo, Y.; Fang, W.; Wang, L.; Rauhut, G.; Zeng, X. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147* (31), 28173–28178.

[2] Shao, X.; Jiang, J.; Sun, B.; Du, Y.; Yu, J.; Francisco, J. S.; Zeng, X. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147* (35), 31984–31991.

[3] Chivers, T.; Laitinen, R. S. *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46* (17), 5182–5192.

High-Precision Nonadiabatic Potential Energy Surfaces and Dynamics of the $Ar^+(^2P_{1/2})$ + CO Charge-Transfer Reaction

Yunlong Shang[1,2], Donghui Zhang[1], Bina Fu[1,*]

[1] State Key Laboratory of Chemical Reaction Dynamics, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China
[2] University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China
*Email: bina@dicp.ac.cn

Ion–molecule reactions are ubiquitous and play fundamental roles in a wide range of gaseous environments, including interstellar clouds, planetary atmospheres, and plasma systems. Among them, charge-transfer (CT) reactions are of particular astrochemical importance, as they govern the formation and destruction pathways of many ionic species. Despite decades of study, a full quantum-state-resolved understanding of these reactions remains challenging due to the complex interplay of long-range interactions and nonadiabatic effects involving multiple electronic states.

To elucidate the charge-transfer dynamics, we construct a high-precision diabatic potential energy surface (PES) for the Ar^+ + CO system. Based on experimental cutoff energies, symmetry-allowed conical intersections (CIs) are identified between the A' (Cs) ground state and the two lowest A'' (Cs) states, corresponding to the Ar + $CO^+(X^2\Sigma^+)$, $Ar^+(^2P_{1/2})$ + CO, and Ar + $CO^+(A^2\Pi)$ states of the system. Spin–orbit coupling is incorporated to correctly resolve the $^2P_{3/2}$ and $^2P_{1/2}$ states with the expected 2:1 intensity ratio. Approximately 10,000 ab initio points are computed via grid-based sampling of the triatomic coordinates, with high-energy regions excluded according to experimental thresholds. Three-state adiabatic FI-NN PESs are first fitted, followed by ansatz-based diabatization to obtain smooth and accurate diabatic PESs.

Finally, nonadiabatic dynamics simulations using surface hopping are planned to capture electronic-state transitions and product distributions, providing direct comparison with experimental observations and deeper insight into the fundamental mechanisms governing ion–molecule charge-transfer processes in astrochemical environments.



Fig. 1 Table of Contents graphic for the study of Ar^+ + CO charge-transfer reactions in astrochemistry.

Keywords： potential energy surface; conical intersections; ion–molecule reaction; non-adiabatic dynamics simulation.

Ultraviolet photodissociation of methanethiol (CH_3SH): Revealing an S(^{1}D) atom elimination channel

Yucheng Wu[1,2], Shunyang Zhou[1], Zijie Luo[1,3], Shuaikang Yang[1], Zhenxing Li[4], Yongxin Dong[3], Wei Hua[1], Quan Shuai[1], Dongxu Dai[1], Michael N.R. Ashfold[5]*, Kaijun Yuan[1,2,6]*, Xueming Yang.[1,6,7,*]

[1]State Key Laboratory of Chemical Reaction Dynamics and Dalian Coherent Light Source, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, 457 Zhongshan Road, Dalian, 116023, China.
[2]University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China.
[3]Marine Engineering College, Dalian Maritime University, Liaoning, 116026, China.
[4]Institute of Advanced Light Source Facilities, Shenzhen, Guangdong, 518100, China.
[5]School of Chemistry, University of Bristol, Bristol, BS8 1TS, U.K.
[6]Hefei National Laboratory, Hefei 230088, China.
[7]Department of Chemistry and Center for Advanced Light Source Research, College of Science, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China.

Abstract

We report time-sliced velocity map imaging studies of the electronically excited sulfur (S(^{1}D)) fragments formed following photoexcitation of jet-cooled CH_3SH molecules in the $2^1A''\leftarrow X^1A'$ absorption band (*i.e.* at wavelengths in the range $190 \leq \lambda \leq 210$ nm). Primary S(^{1}D) products are observed when exciting at $\lambda \leq 204$ nm and their relative yield is deduced to increase quite steeply with decreasing wavelength, but quantum yield estimates are beyond the scope of the present work. Image analysis reveals that the CH_4 partners are formed with a highly inverted vibrational population distribution, largely concentrated in the asymmetric stretch mode (ν_4). A possible formation mechanism for the S(^{1}D) + CH_4 products is suggested, based on frustrated C–S bond extension on the initially populated $2^1A''$ potential energy surface (PES) and re-collision between the embryonic CH_3 and SH moieties in the extended region of conical intersection between the $2^1A''$ and $1^1A''$ PESs *en route* to the target products. Cutting edge electronic structure calculations along with complementary *ab initio* molecular dynamics studies should help validate or overturn this envisaged mechanism.

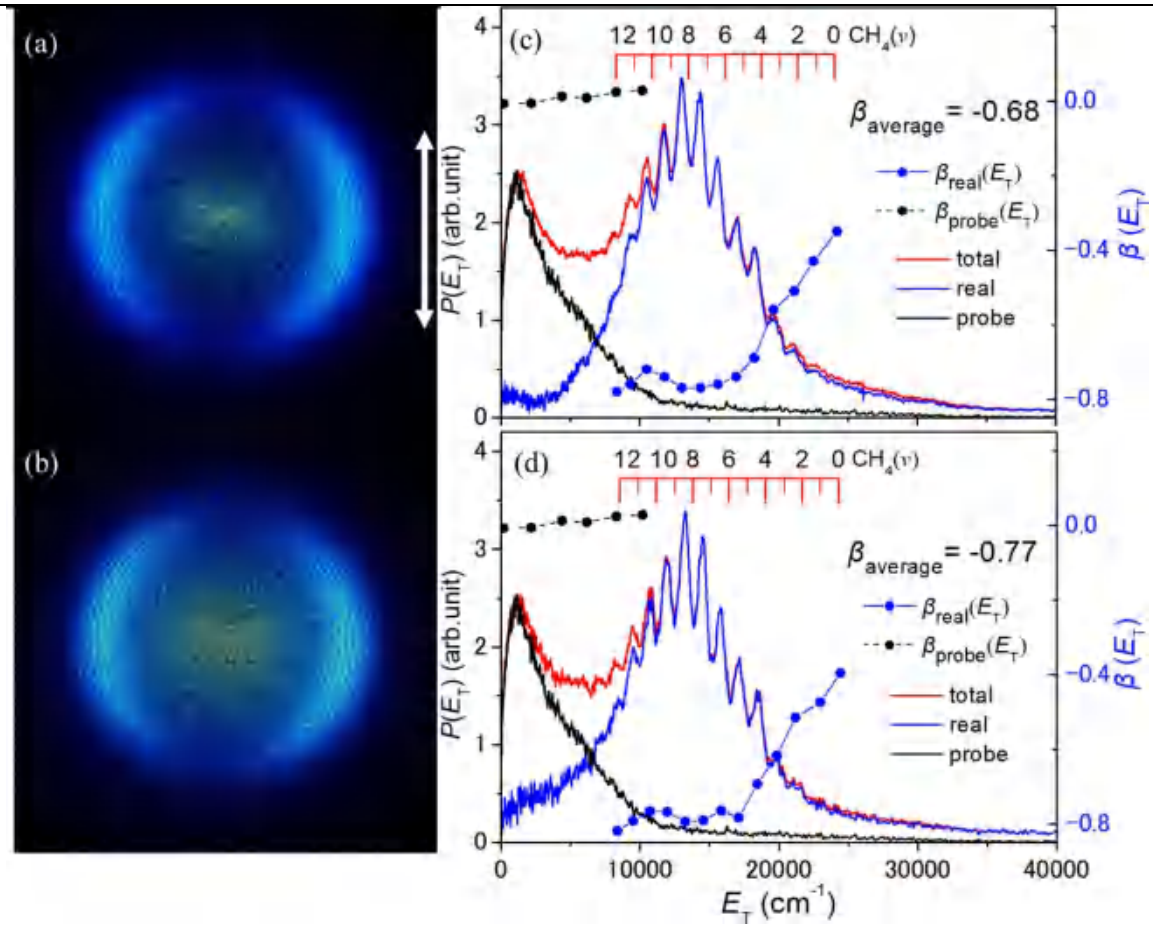


Fig. 1 TS-VM images of the S(^{1}D) fragments formed by photolysis of jet-cooled CH_3SH molecules at λ = (a) 192 and (b) 191 nm, with ε_{phot} aligned vertically in the plane of the image as indicated by the double headed arrow in (a). Panels (c) and (d) show the $P(E_T)$ distributions derived from this two-colour image (red trace), from the 130.091 nm probe-laser only image (black trace) and the 'real' pump-probe two-colour $P(E_T)$ distribution obtained from the difference (blue trace), referenced to the left-hand y-axis scale. The black and blue dots show the $\beta(E_T)$ distributions derived from the corresponding traces, referenced to the right-hand y-axis scale. The $\beta_{average}$ value for the signal from photolysis laser induced dissociation determined over the indicated ET range is also included in the inset. The red combs in panels (c) and (d) show the maximum E_T values for different S(^{1}D) + $CH_4(v_4)$ product channels.

Keywords：methanethiol; photodissociation; S(^{1}D)

References：

[1] Z.C. Chen, Q. Shuai, A.T.J.B. Eppink, B. Jiang, D.X. Dai, X.M. Yang and D.H. Parker, *Phys. Chem. Chem. Phys*. 2011, **13**, 8531-8536.

[2] D.V. Chicharro, S.M. Poullain, L. Rubio-Lago and L. Bañares, *J. Phys. Chem. A* 2019, **123**, 8552-8561.

An accuracy permutationally invariant potential energy surface for the reaction dynamics of B^+ with H_2O

Junlong Li[1], Jun Li[1,*]

[1]School of Chemistry and Chemical Engineering & Chongqing Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Chongqing University, Chongqing 401331, China

This study investigates the reaction dynamics of the ion–molecule system $B^+ + H_2O$[1]. We have identified two possible reaction pathways: the primary channel leading to $H + BOH^+$, with a secondary channel yielding $H + HBO^+$. We performed high-precision electronic structure calculations for all reactants, products, and stationary points. Geometries were optimized at the CCSD(T)-F12a/AVTZ level[2], with single-point energies calculated up to CCSDT(Q)/pVQZ[3]. A key finding is the complexity of the $H + BOH^+$ channel, where the reaction is found to proceed via pathways on two distinct spin states: the singlet and the triplet potential energy surfaces (PES). Based on these high-accuracy data, we constructed a full-dimensional, high-accuracy PES. The PES employed single-point energy data from CCSD(T)-F12a/AVTZ calculations and was fitted using the PIP-NN (Permutational Invariant Polynomial-Neural Network) method. The resulting fitting RMSE is less than 1 meV. Since experimental reaction rate data for this system are available at 137 K, we plan to perform dynamics simulations using the **Caracal** program[4], which implements the RPMD method. RPMD is chosen for its ability to accurately simulate low-temperature reaction rates and capture essential quantum effects. This research aims to provide precise theoretical rate constants and a detailed reaction mechanism for boron chemistry, enabling reliable comparison with experimental results.

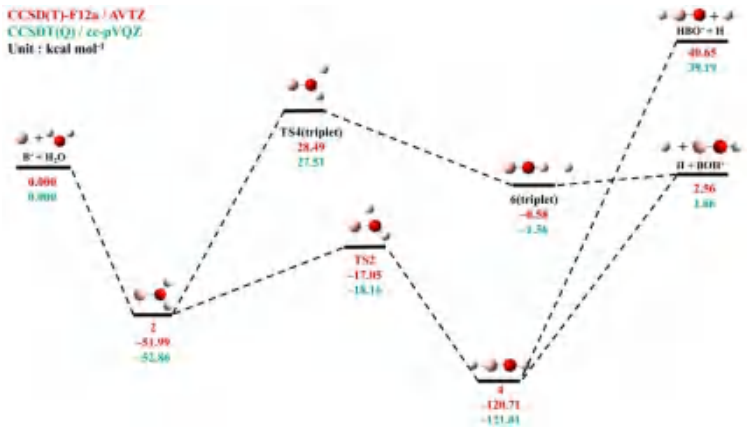


Fig. 1 Schematic illustration of the reaction pathways of the reaction. All energies are in kcal/mol and relative to the reactant ($B^+ + H_2O$).

Keywords：Ion-molecule reaction；Astrochemistry；Potential energy surface；kinetics

References：

[1] C. H. Chin.; A. M. Mebel.; D. Y. Hwang. J. Phys. Chem. A. 2004, 108: 473.

[2] T. B. Adler.; G. Knizia.; H. J. Werner. J. Chem. Phys. 2007, 127: NO.221106.

[3] Y. J. Bomble.; J. F. Stanton.; M. Kállay.; J. Gauss. J. Chem. Phys. 2005, 123: NO.054101.

[4] J. Steffen. J. Chem. Theory Comput. 2023, 19: 5334.

Interstellar chemical evolution of phosphorus nitride (PN): [P, N, $H_{1,2}$] isomers

Junjie Jiang[1], Xiaoqing Zeng[1,*]

[1]Department of Chemistry, Fudan University, Shanghai 200433 (China)
*Email: xqzeng@fudan.edu.cn

As a heavy analogue of N_2, phosphorus nitride (PN) has been viewed as the most crucial phosphorus-bearing interstellar molecule and attracts enormous interest on its bond properties and reactivities. PN can undergo spontaneous polymerization under 30 K which hampers its study greatly. Considering PN is most abundant P-containing interstellar molecule in the interstellar medium, the hydrogenation process of PN is foreseeable, which leads to the formation of molecules with the composition of [P, N, H_n]. Here, we report the preparation and characterization of elusive HNP•, HPN•, cis/trans-HPNH, H_2NP molecules with matrix-isolation IR spectroscopy. The photochemistry and quantum tunneling mechanisms between the isomers are also disclosed.

Keywords：phosphorus nitride, aminophosphinidene, quantum tunneling, photochemistry

References：

[1] J. Jiang, L. Huang, B. Zhu, W. Fan, L. Wang, I. Y. Zhang, W. Fang, T. Trabelsi, J. S. Francisco, X. Zeng, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202414456

[2] J. Jiang, L. Wang, R. Guntram, X. Zeng, et al. Nat. Commun. 2025, under revision.

Time-Slice Ion Velocity Imaging of CH_3Cl Photolysis at Valence and Rydberg State

Yucheng Wu[1], Zijie Luo[1], Shuaikang Yang[1], Wei Hua[1], Shunyang Zhou[1], Yongxin, Dong[1], Kaijun, Yuan[1,*], Xueming, Yang[1,*]

[1]State Key Laboratory of Molecular Reaction Dynamics and Dalian Coherent Light Source, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, 457 Zhongshan Road, Dalian 116023, China

*Email: kjyuan@dicp.ac.cn

The photodissociation of polyatomic molecules often involves different potential energy surfaces, which can be coupled, and the process can along different pathways on these surfaces. Methyl halogenides CH_3X (X = Cl, F, I, Br) represent the benchmark systems to investigate the pathways of intersurface photodissociation dynamics. The unique role of the C-X bonding in these molecules combines the simplicity of the diatomic photolysis with the complexity of multidimensional potential hypersurfaces of polyatomic molecules involving different vibronic states and conical intersections. Although the valence states of CH_3X have been extensively investigated, Rydberg states remains largely unexplored. In this paper, we present a comprehensive investigation of CH_3Cl photolysis at valence and Rydberg states. The channels $CH_3(v)$ + Cl of methyl with different vibrational states were obtained by analyzing the images of time-slice ion velocity imaging. The experimental results show that the anisotropic distribution of the products changes from extreme perpendicular to extreme parallel as the wavelength becomes shorter, and the vibration mode of the methyl group changes from umbrella vibration mode to stretch vibration mode when the parent molecules gradually change to dissociate on the Rydberg states.

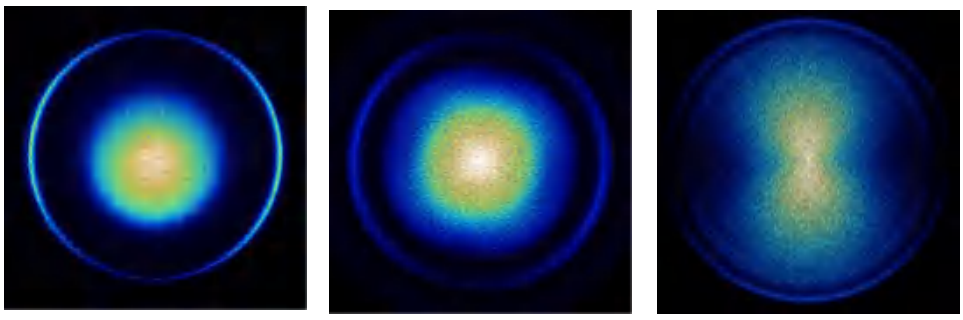


Fig. 1 Ion images of $CH_3(v_s=1)$ from VUV photodissociation of CH_3Cl recorded using the (2+1)REMPI probe scheme.

Keywords： Rydberg State; VUV-FEL; CH_3Cl; CH_3 Detection

References：

[1] Ivo S. Vinklárek, Jozef Rakovský, Viktoriya Poterya, and Michal Fárník, The Journal of Physical Chemistry A, 2020, 124 (38), 7633-7643.

[2] Dave Townsend, Suk Kyoung Lee, and Arthur G. Suits, The Journal of Physical Chemistry A, 2004, 108 (39), 8106-8114.

时间延迟质谱-影像研究一氧化碳分子冰面光脱附动力学

丁国庆[1]，韩梓杰[1]，孙中发[1,*]

[1]安徽师范大学，安徽省芜湖市九华南路 189 号，241002
*zfsun@ahnu.edu.cn

一氧化碳（CO）分子被广泛认为是星际介质中衡量气体密度和温度的重要示踪分子。在恒星和行星形成的寒冷区域，气相 CO 会在（亚）微米尺度的星际尘埃颗粒上凝结，形成固态 CO 分子冰层。在星际紫外（UV）和真空紫外（VUV）辐射的照射下，CO 分子冰可发生光诱导脱附过程，使冰表面释放出气相 CO 分子。该光致脱附机制被认为是气相 CO 分子在远低于其热脱附温度的环境中仍然存在的主要非热来源之一。尽管陆基与空间望远镜已在宇宙众多冷区中清晰探测到光诱导产生的 CO 信号，但 CO 分子冰的微观光脱附机制仍不完全清楚，尤其是光诱导间接脱附途径中涉及的能量转移过程尚未被充分揭示。

近期，我们结合 VMI (Velocity Map Imaging) 技术搭建了一套态分辨与态选择的低温分子冰面光化学成像谱仪，依托该谱仪，课题组研究了 UV 光诱导一氧化碳分子冰面脱附过程，获得了脱附产物的量子产率、内态布局和脱附机理等信息。

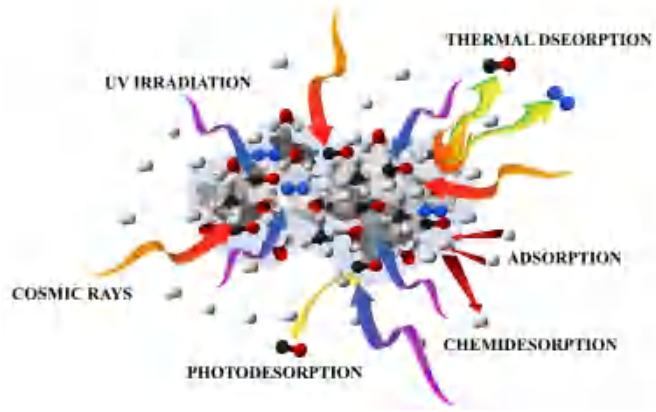


图1：星际冰的形成与光子诱导脱附示意图

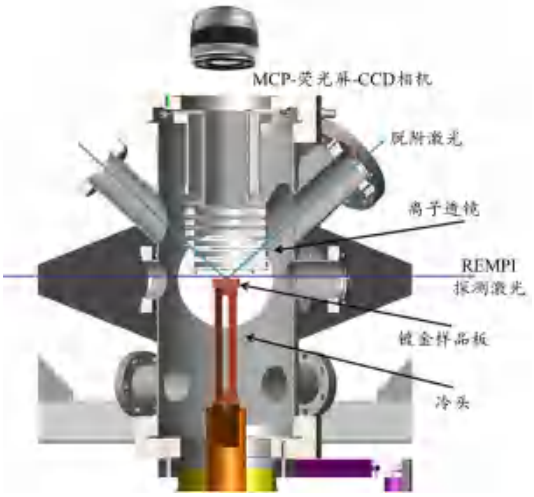


图2：实验腔体示意图

关键词：星际冷区；分子冰；光脱附

参考文献：

[1] Hacquard, Antoine B., et al. *J. Chem. Phys.* 2024, 161(18): 184306.

[2] Scheidsbach, R. J., & Parker, D. H. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 21(26): 14278

星际尘埃和星际冰模拟实验装置

孔德轩[1]，张驰军[1,*]，何佼[1]

[1]深圳技术大学工程物理学院，广东省深圳市坪山区兰田路 3002 号
*Email: zhangchijun@sztu.edu.cn

星际尘埃表面的冰幔在星际复杂有机分子的形成及星际化学演化过程中扮演着至关重要的角色。对星际分子的天文观测与理论模型构建很大程度上依赖于在实验室中对尘埃及其表面冰幔以及冰幔内部发生的物理化学过程进行模拟。深圳技术大学目前正在搭建两套实验装置：装置一主要用于模拟星际尘埃的生长过程，重点研究硅酸盐和碳质尘埃样本的生长过程、光谱特性与结构分析。该装置采用 532 nm 激光溅射硅酸盐或碳靶材，并以惰性气体作为载气，将硅酸盐或碳质颗粒沉积在低温基底上，制备出星际尘埃样品。装置二则主要针对星际冰与彗星冰表面发生的吸附、脱附、扩散及化学反应展开研究，该装置将加载一条分子/原子束源。两套系统均集成四极杆质谱仪和傅里叶变换红外光谱仪作为分析手段。本报告将展示两套实验装置的设计图、主要功能与技术参数。

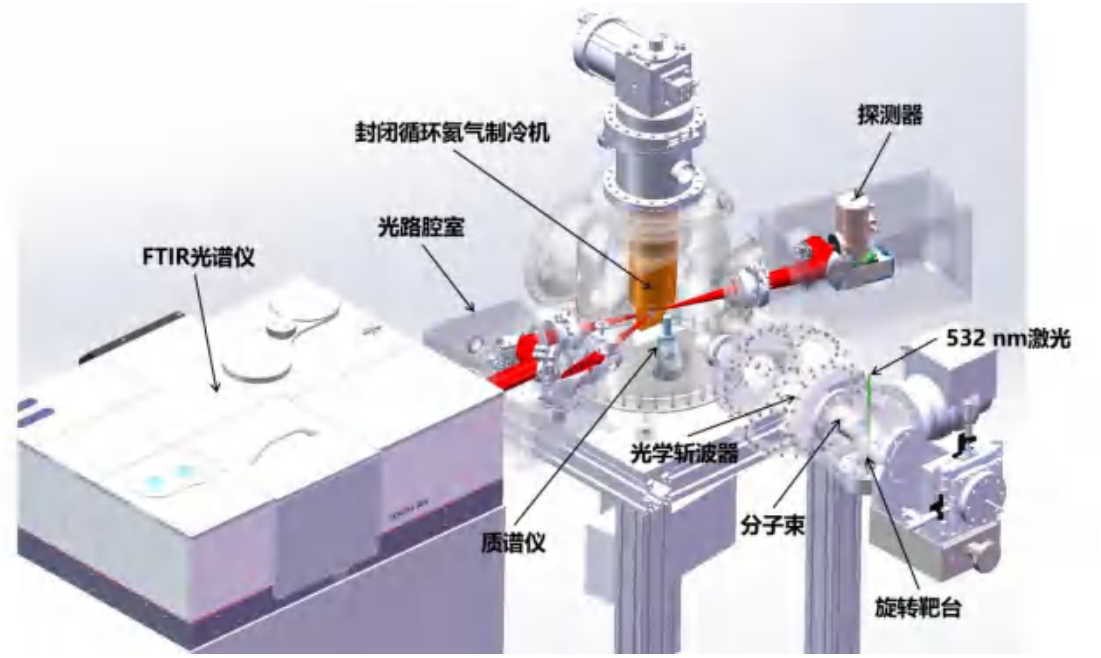


图1：星际尘埃生成和星际冰物理化学过程研究实验装置示意图

关键词：天体化学；彗星冰；星际尘埃；尘埃冰幔

参考文献：

[1] He, J.; Perotti, G.; Emtiaz, S. M.; Toriello, F. E.; *Astron Astrophys* **2022**, 668, A76.

[2] He, J.; Simons, M.; Fedoseev, G.; Chuang, K.-J.; *Astron Astrophys* **2022**, 659, A65.

[3] Jäger, C.; Mutschke, H.; Henning, Th.; Huisken, F.; *ApJ* **2008**, 689 (1), 249.

OCS 的双光子光解离动力学研究：S（^{1}S）原子通道

董永昕[1,2]，杨帅康[1]，张志国[1,3]，罗子杰[1]，巫雨承[1]，李振兴[1]，帅全[1]，车丽[2]，袁开军[1]*，杨学明[1]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市中山路 457 号，116023

[2] 大连海事大学，辽宁省大连市甘井子区凌海路 1 号，116026

[3] 阜阳师范大学，安徽省阜阳市清河西路 100 号，236037

* Email: kjyuan@dicp.ac.cn

OCS 分子在大气 S 循环中扮演着十分重要的角色。平流层中 OCS 光解产生的 S 原子可以发生进一步反应生成硫酸盐，使得 OCS 成为大气中平流层硫酸盐气溶胶(SSAs)最主要的无机物来源。硫酸盐气溶胶会破环平流层中的臭氧分子，并会影响大气中的辐射平衡。作者利用时间切片离子成像实验装置，研究 OCS 在 290.10-308.84nm 波段的光解动力学。实验中获得了产物 S(^{1}S)的离子速度图像，并进一步获得了产物通道 S($^1S_{J=0}$)+CO($X^1\Sigma_g^+$)的动力学信息：产物的速度分布，振动分辨的角分布以及振动态布居等。结合前人的研究，我们提出了一种可能的解离机制：OCS 分子在 290.10-308.84nm 范围内吸收两个光子后，可能经历 $^1\Delta/^1\Sigma^-\leftarrow1^1\Sigma^+$、$2^1\Sigma^+\leftarrow{}^1\Delta/^1\Sigma^-$的垂直跃迁，然后直接解离或耦合到其他电子态发生解离。

关键词：氧硫化碳；光解离；时间切片离子成像

参考文献：

[1] Toshinori Suzuki; Hideki Katayanagi; Shinkoh Nanbu; et. al.J. Chem. Phys. 109, 5778–5794 (1998).

[2] Xie T,Chen W,Yuan D,Yu S,Fu B,Yuan K,Wang X*,Yang X.J.Phys. Chem.A2020, 124,6420−6426.

Two-photon Photodissociation Dynamics Study of CS_2: The S(^{1}S) Atom Channel

Shuaikang Yang [1,2], Zhiguo Zhang[2,3], Yongxin Dong[2], Zijie Luo[2], Zhenxing Li[2], Quan Shuai[2], Xingan Wang[1], Kaijun Yuan[2*] and Xueming Yang[2]

[1]Department of Chemical Physics, School of Chemistry and Materials Science, University of Science and Technology of China, Hefei, Hefei, Anhui, China, 230026
[2]State Key Laboratory of Chemical Reaction Dynamics and Dalian Coherent Light Source, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, Liaoning, China, 116023
[3]Key Laboratory of Functional Materials and Devices for Informatics of Anhui Higher Education Institutions and School of Physics and Electronic Engineering, Fuyang Normal University, Fuyang, Anhui, China, 236041
*Email: kjyuan@dicp.ac.cn

Two-photon photodissociation dynamics of carbon disulfide (CS_2) were studied by means of the sliced velocity map ion imaging technique. The S(^{1}S) + CS($X^1\Sigma^+$) channel was directly observed from the measured images of S(^{1}S) products in the wavelength range of 290.10-336.88 nm. The translational energy distributions and angular distributions of fragments have been derived. Rovibrational states of the CS($X^1\Sigma^+$) co-products were partially resolved in the translational energy spectra, and can be populated up to the energy limit of the available energy. Experimental results also show that the product anisotropy parameters $\beta_2 > 0$ and $\beta_4 \sim 0$. The latter indicates that the intermediate state reached by the first one photon excitation has a quite long lifetime, while the former suggests the molecules undergo a parallel transition from the intermediate state to the final state upon the second photon excitation, and then experience a fast dissociation process. Combined with previous studies, we propose a possible dissociation mechanism: after absorbing two photons in the range of 290.10-336.88 nm, the CS_2 molecule may undergo a sequential transition $^1A_1(^1\Sigma_g^+) \leftarrow 1^1B_2(^1\Delta_u)/^1A_2(^1\Delta_u) \leftarrow X^1\Sigma_g^+$, then directly dissociates or couples to other electronic states and dissociates.

Keywords: Carbon Disulfide, Photodissociation, Time-sliced velocity map ion imaging

References：

[1] Kawasaki, M.; Sato, H.; Kikuchi, T.; Fukuroda, A.; Kobayashi, S.; Arikawa, T. *J. Chem. Phys*. 1987, 86: 4425.

[2] Kawasaki, M.; Sato, H.; Kobayashi, S.; Arikawa, T. *Chem. Phys. Lett*. 1998, 146: 101.

[3] Venkitachalam, T. V.; Rao, A. S. *Spectrochimica Acta*. 1992, 48A: 1555.

Investigating the Two-Photon Photodissociation Dynamics of SO2 Molecules in the Vicinity of 300 nm

Zijie Luo[1], Yucheng Wu[1], Shuaikang Yang[1], Wei Hua[1], Shunyang Zhou[1], Yongxin Dong[1], Kaijun Yuan[1,*], Xueming Yang[1,*]

[1]State Key Laboratory of Chemical Reaction Dynamics and Dalian Coherent Light Source, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, 457 Zhongshan Road, Dalian 116023, China

*Email: kjyuan@dicp.ac.cn

Produced by both nature and human activities, sulfur dioxide (SO_2) is an important species in the earth's atmosphere. The SO_2 molecule is of great interest for a variety of scientific disciplines and for a range of different reasons. The photodissociation and absorption cross sections of SO_2 have consequently been studied for many years, not only in experiments but also in theoretical calculations. SO_2 is a typical molecule for studying the predissociation of electronically excited states following photoexcitation. In this paper , we present a comprehensive investigation of the two-photon-induced photodissociation dynamics of sulfur dioxide (SO_2) in the 300-320 nm ultraviolet spectral region. By analyzing the images from the time-sliced velocity map ion imaging method, the vibrational state population distributions were obtained for the $S(^1D)+O_2$ channel. The experimental findings reveal that SO_2 undergoes photodissociation through a sequential photon absorption mechanism. Initially, the molecule absorbs a photon to reach an intermediate state characterized by a remarkably long lifetime, potentially ranging from tens to hundreds of microseconds. Subsequently, the absorption of an additional photon induces dissociation, leading to the formation of product fragments. The state-to-state dynamical pictures shown in this work provide a rigorous test of the potential energy surface.

Keywords： Sulfur Dioxide, Photodissociation Dynamics, Two-Photon-Induced

References：

[1] Li, Z. X.; Fu, Y. L.; Luo, Z. J.; et al. *Science*. 2024, 383: 746-750.

[2] Luo, Z. J.; Zhang, Z. X.; Yang, S. K.; et al. *J. Chem. Phys.* 2023, 159: 024307

HOD 光解动力学中的“单缝衍射”机制

王俊彦[1#]，罗子杰[2#]，…，韩山雨[3,*]，谢代前[1,*]，袁开军[2,*]，杨学明[2]

[1] 南京大学化学化工学院，江苏南京，210023
[2] 大连化学物理研究所，辽宁大连，116023
[3] 南京大学国际同位素研究中心，江苏南京，210023
*Email: shhan@nju.edu.cn, dqxie@nju.edu.cn, kjyuan@dicp.ac.cn

粒子的波动性可产生量子干涉，从而影响化学反应结果。以往实验观测到的干涉现象均源于两条拓扑结构不同的反应路径，类似于光学中的杨氏双缝干涉。然而，是否存在仅由单一反应路径内部产生的干涉效应，即类似“单缝衍射”的化学过程，无论在理论还是实验上均未得到验证。

水的光解过程为研究此类问题提供了理想平台。本工作结合理论与实验，在 121 nm 附近对 HOD 光解离过程展开研究，发现 OD(X)产物转动态分布随激发波长剧烈变化。理论方面，我们基于机器学习方法构建了 H_2O 分子四个电子态的透热势能矩阵，半定量重现了实验现象。进一步分析表明，该现象源于解离过程中直接路径与间接路径之间的动力学干涉。两条路径均穿越同一锥形交叉（位于 H-OD 线形构型）：直接路径在首次经过锥形交叉时即发生非绝热跃迁；间接路径则在上势阱中短暂陷获后再发生跃迁。尽管空间上属于同一反应路径，但是二者在时间上可区分，从而产生干涉效应。

本研究首次揭示了一种新型量子干涉机制，即穿越同一锥形交叉的直接与间接解离路径之间的干涉，可类比为光学中的单缝衍射。该发现揭示了锥形交叉诱导的非绝热动力学中隐藏的复杂性，对光化学、光生物学及光催化等领域具有普遍意义。

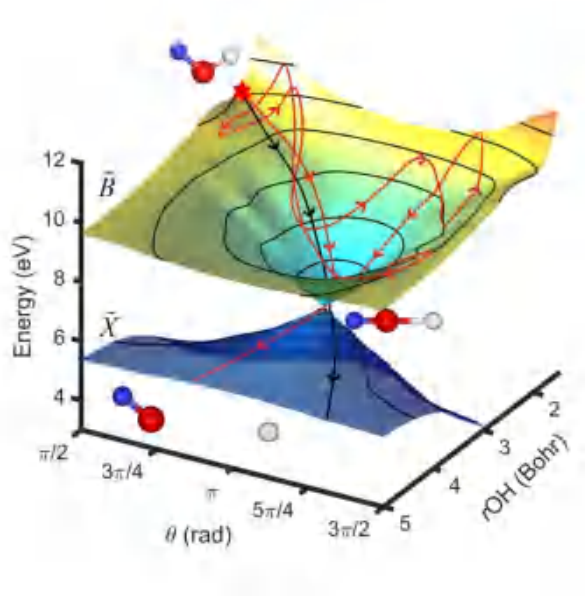


图 1：分子通过锥形交叉时的直接与间接路径

关键词：锥形交叉；量子干涉；同位素效应

参考文献：

[1] Junyan Wang[#], Zijie Luo[#], Linsen Zhou, Xixi Hu, Zhenxing Li, Hua Guo, Shanyu Han*, Daiqian Xie*, Kaijun Yuan*, Xueming Yang, “Dance at a Conical Intersection: Interference between Direct and Indirect Paths”. (To be submitted)

低温态选择锂原子反应动力学研究

汪鑫[1]，武文杰[1]，彭永旭[1]，谢雨润[1,2]，孙羽[2]，杨天罡[1,*]，杨学明[1,3]

[1] 南方科技大学化学系，先进光源科学中心，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055
[2] 深圳先进光源研究院，广东省深圳市光明区新湖街道圳园路 268 号 3 号楼 3-6 层，518107
[3] 中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市中山路 457 号，116023
* *Email: yangtg@sustech.edu.cn*

一直以来，锂元素是连接宇宙大爆炸、星际物质和恒星的关键元素，对锂元素的研究是宇宙和恒星演化的重要课题，锂与各种分子和离子的反应也一直备受关注[1,2]。因此，制备低温和量子态可调控的锂原子，对于理解锂的反应动力学和星际化学过程至关重要。我们自主设计搭建了一套用于制备低温且量子态可调的^{7}Li 原子的实验装置，该装置集成塞曼减速器、磁光阱与激光冷却技术。通过调节塞曼减速器的磁场梯度与激光失谐，成功将初始速度高于 1000 m/s 的 Li 原子减速至 53–544 m/s 范围，并在磁光阱中进一步冷却至约 22 mK，最终捕获约 10^9个原子[3]。通过调控冷却激光参数，可实现 Li 原子特定电子态（如 $2S_{1/2}$和 $2P_{1/2}$）的选择性布居。本装置为开展低温条件下原子与中性分子、带电离子等体系的反应动力学测量提供了实验平台。进一步地，通过将磁光阱与线性保罗阱耦合，构建了混合原子—离子系统，为研究超冷原子—离子碰撞过程提供了新途径[4]。该平台所获得的精确动力学数据有望为星际化学模型的完善提供关键实验支持。

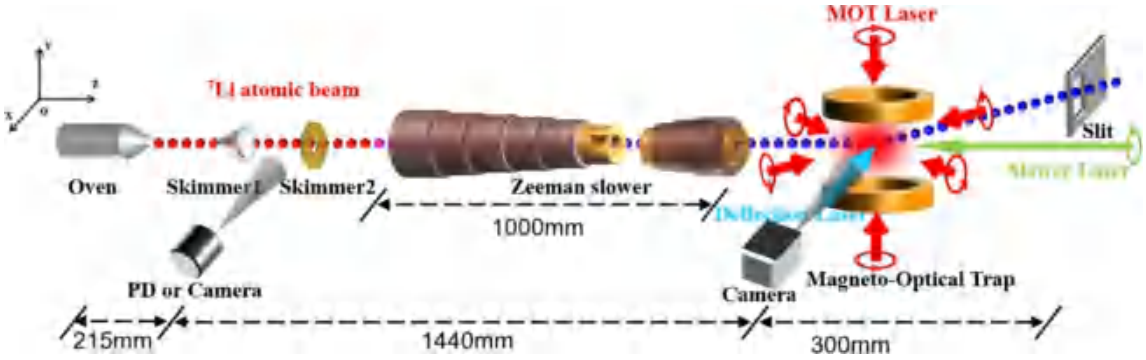


图1：实验装置示意图

关键词：锂；原子束；塞曼减速器；磁光阱

参考文献：

[1] Kumar, Y.B.; Reddy, B.E.; Campbell, S.W.; Maben, S.; Zhao, G., Ting, Y.-S. *Nat. Astron*. 2020, 4: 1059-1063.

[2] Hou, S.Q.; Kajino, T.; Trueman, T.C.L.; Pignatari, M.; Luo, Y.D., Bertulani, C.A. *Astrophys. J.* 2021, 920: 145.

[3] Wang, X.; Li, J.; Liu, L.; Xiao, Y.; Li, Z.; Wang, T.; Sun, Y.R., Yang, T. *Chem. Phys. Lett.* 2025, 860: 141781.

[4] Peng, Y.; Li, J.; Song, Z.; Li, M.; Xiao, Y.; Wang, X.; Wang, T.; Xie, Y.; Li, J., Yang, T. *JACS Au*. 2025, 5: 4260-4267.

Reactions of Criegee Intermediates with C_4F_7N

Haotian Jiang[1], Chunlei Xiao[1], Wenrui Dong[1*] and Xueming Yang[1,2]

1Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China

2Department of Chemistry, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China

*Email: wrdong@dicp.ac.cn

Perfluorinated compounds (PFAS) are widely recognized as emerging contaminants due to their persistence, bioaccumulation potential in the environment and the human body, and associated health concerns. This study reveals a novel atmospheric removal pathway for perfluoroisobutyronitrile (C_4F_7N) via reaction with Criegee intermediates (CIs). Experiments determined that the rate coefficient for the reaction between the simplest CIs, CH_2OO, and C_4F_7N is $(1.03 \pm 0.19) \times 10^{-13}$ cm^3 $molecule^{-1}$ s^{-1} at 298 K, which is 70 times greater than the rate coefficient for its reaction with OH. Based on the measured rate coefficients, the atmospheric lifetime and global warming potential (GWP) of C_4F_7N have been recalculated.

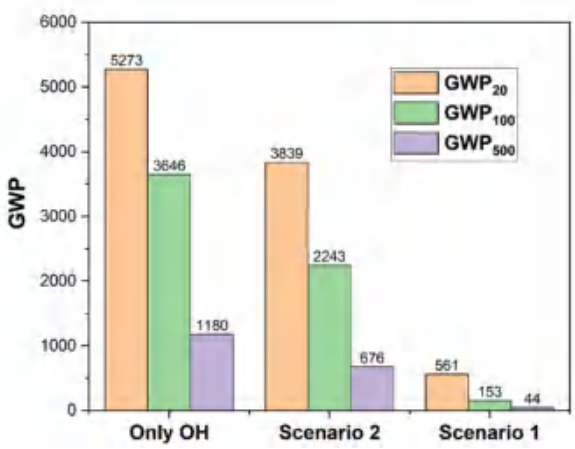


Fig. 1 The recalculated GWP value of C_4F_7N

Keywords：Radical Reaction Kinetic, Criegee Intermediate, Reaction Rate Coefficient

References：

[1] Haotian Jiang#, Chaolu Xie#, et al., J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 14, 12263-12272
[2] Haotian Jiang, Yue Liu, et al., J. Phys. Chem. A 2024, 128, 25, 4956-4965.

冷分子碰撞传能研究

王少培[1]，张寒辉[2]，程存峰[3*]，胡水明[3*]

[1] 未来技术学院，中国科学技术大学，合肥 230026
[2] 深圳先进光源研究院，深圳 518107
[3] 合肥微尺度物质科学国家研究中心，中国科学技术大学，合肥 230026
*Email: cfcheng@ustc.edu.cn, smhu@ustc.edu.cn

一氧化碳作为星际空间中丰度第二大的分子，其碰撞过程广泛存在于星际化学环境中。研究一氧化碳碰撞过程的机理，对于构建可信的天文模型、理解星际介质演化至关重要。由于冷分子体系的散射过程只涉及少数分波，研究冷分子碰撞过程更易观察到量子共振现象，这对于理解碰撞过程的物理机制有重要意义。我们提出一种基于单一分子束流的冷分子实验方法和装置，利用精密中红外激光进行选态和选速度激发，研究振动激发的分子间的碰撞传能过程。通过调节激光频率选择性激发具有特定纵向速度的一氧化碳分子至选定的振-转量子态，实现碰撞能的精确分辨与量子态的精确调控。目前我们已经建设了实验平台，实现了一氧化碳的高效率选态激发，后续将开展激发态一氧化碳分子的碰撞传能过程研究，探测其中的量子共振效应，揭示碰撞传能的微观碰撞动力学机制。

关键词：碰撞传能；选态激发；碰撞能分辨；量子共振；

参考文献：

[1] Perreault, W.E., N. Mukherjee and R.N. Zare, Quantum control of molecular collisions at 1 kelvin. Science, 2017. 358(6361): p. 356-359.

[2] Sun, Z., et al., Molecular square dancing in CO-CO collisions. Science, 2020. 369(6501): p. 307-309.

[3] Liu, Q., et al., Preparation of High Vibrational States in the Entire Molecular Beam. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2024. 15(39): p. 9926-9931.

自旋-轨道态选择的 Ar^+与 CO 的电荷转移动力学研究

王汉尧[1,2]，程敏[1,2]，高蕻[1,2,*]

[1] 中国科学院化学研究所，北京分子科学国家研究中心，北京市海淀区中关村北一街 2 号，100190
[2] 中国科学院大学，北京市海淀区中关村东路 80 号，100190
*Email: honggao2017@iccas.ac.cn

摘要正文：电荷转移反应是离子-分子反应中最重要的反应类型之一，在诸如星际化学、行星大气化学、燃烧及等离子体化学等领域的研究中均占有重要地位。在过去的 60 多年中，虽然已对电荷转移反应 Ar^++CO→Ar+CO^+进行了大量的理论和实验研究，然而并未在“态-态”反应的层级上更进一步[1]。基于自制的离子-分子交叉散射装置[2,3]，在不同相对碰撞能下对处于不同自旋-轨道态的 Ar^+与 CO 的电荷转移反应产物 CO^+进行了三维速度成像，获得了产物三维速度分布的中心切片。如图 1 所示，两速度分布的共同之处在于，基态 $CO^+(X^2\Sigma^+)$均分布在前向 v'=5-8，表明存在共振电荷转移机理；而第一电子激发态的 $CO^+(A^2\Pi)$均在侧向存在一个峰，表明存在疑似虹散射的反应机理。整体上 CO^+速度随散射角的增大而急剧减小，则说明了产物离子的内激发对散射角具有高度的依赖关系。更加值得注意的是二者的不同之处：如图 1(a)所示，基态 $Ar^+(^2P_{3/2})$与 CO 反应的第一电子激发态产物 $CO^+(A^2\Pi)$的速度分布在前向是空缺的，而图 1(b)所示的激发态 $Ar^+(^2P_{1/2})$反应产物则在同样的位置上存在明显信号，说明二者存在完全不同的前向散射机理。这是在电荷转移体系中观察到的全新现象，但对反应机理的具体分析仍需结合高精度的理论计算。

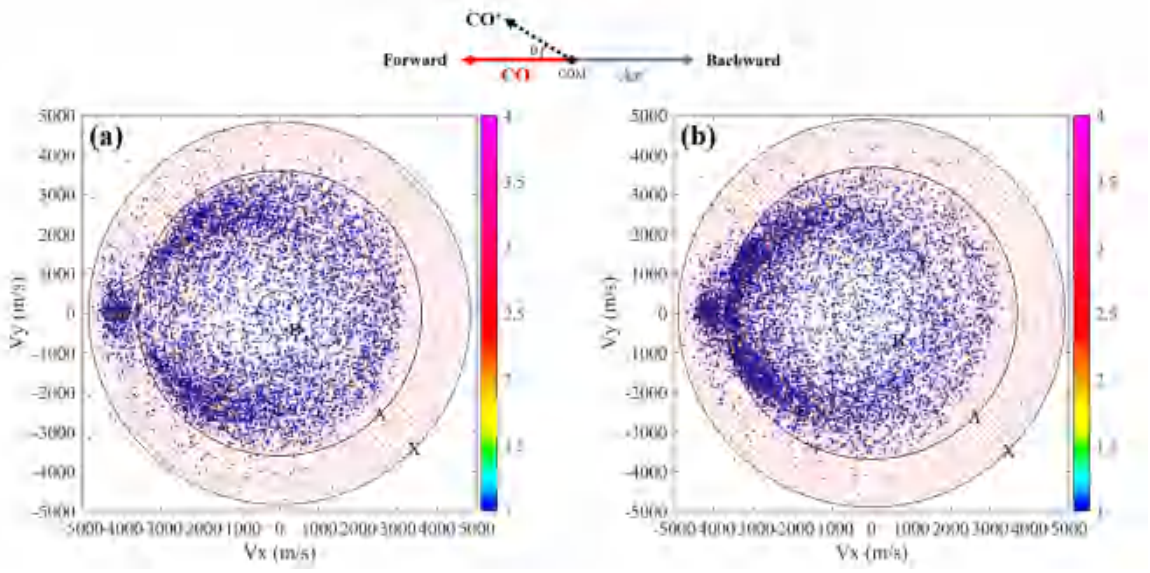


图1：相对碰撞能为4.00eV时(a) $Ar^+(^2P_{3/2})$、(b) $Ar^+(^2P_{1/2})$分别与CO碰撞发生电荷转移反应，产物CO^+三维速度分布的中心切片。顶部的牛顿图给出了质心系下各物种的速度及产物CO^+的散射角θ，将CO的飞行方向定义为前向。各同心圆均代表运动学截止面，标有英文字母的黑色同心圆表示CO^+的各电子能级，而红色同心圆则表示CO^+在各电子能级内的振动能级。

关键词：离子−分子反应；量子态选择；三维速度成像；电荷转移

参考文献：

[1] Ding, Y.; Cheng, M.; Gao, H. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2024, 15(23): 6038-6044.

[2] Zhang, G.; Guan, L.; Cheng, M.; Gao, H. *Rev. Sci. Instrum.* 2021, 92: 113302.

[3] Zhang, G.; Guan, L.; Yan, Z.; Cheng, M.; Gao, H. *Chin. J. Chem. Phys.* 2021, 34: 71–80.

F + C_2H_2 反应的高精度全维势能面构建

娄敬 [1]，张东辉 [1]，傅碧娜 [1,*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，大连市中山路 457 号，116023
*Email: bina@dicp.ac.cn

研究面向激光化学中的重要体系 F + C_2H_2，基于高精度从头算能量拟合的神经网络全维势能面解析其微观反应机理。对相似体系 Cl + C_2H_2 的研究[1]发现抽取反应中漫游机制占主导地位（>97%），本研究也主要从抽取通道出发全面展开动力学研究。采用 UCCSD(T) / aug-cc-pVQZ 方法计算了约 3 万数据点的单点能，覆盖了如图 1（左）所示所有通道的构型，并以基本不变量-神经网络模型（FI-NN）拟合全维势能面，拟合误差（见图 1（右））RMSE 约 30 meV。利用准经典轨线方法（QCT）随机生成大量轨线分析表明，在 60 kcal/mol 碰撞能下，主要产物为 HF + CH，对应抽取反应通道，最大碰撞参数约 2.4 Å；抽取反应机理中直接抽取占比较小，而经加成中间体 I1 再抽取的漫游路径占比较高。当前势能面已具有较好的稳定性，后续将继续补点至收敛，进而获取更可靠的反应截面与速率常数等动力学量。

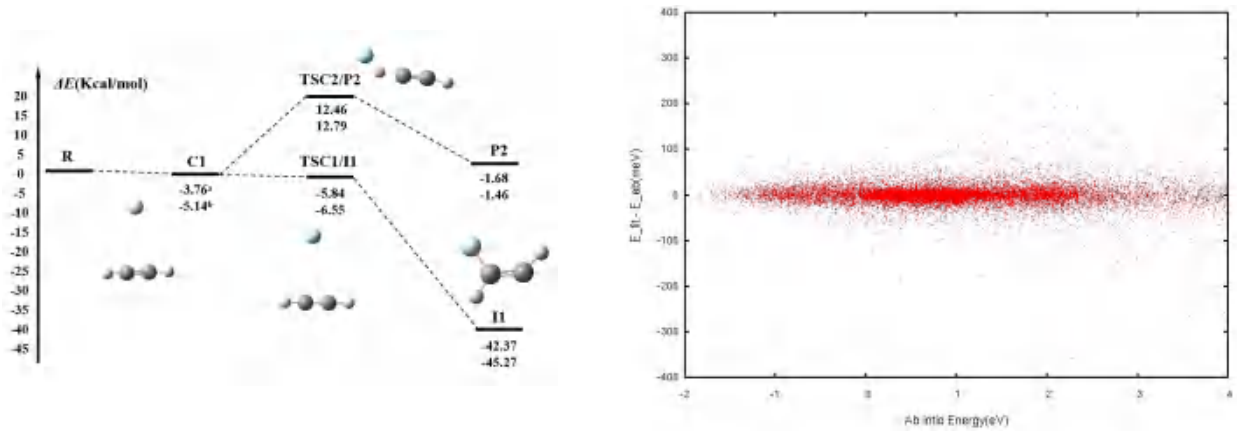


图1：（左图）F + C_2H_2 抽取、加成反应路径图。a)为小基组计算结果，b)为高精度计算结果。（右图）势能面中所有数据点相对于从头算能量的误差

关键词：势能面；漫游机制；FI-NN；准经典轨线

参考文献：

[1] Bai Y, Fu Y-L, Qi J, Liu L, Lu X, Han Y-C, Zhang D H, Fu B. *Nature Communications.* 2025, 16(1): 2732.

[2] Fu B, Zhang D H. *National Science Review.* 2023, 10(12): nwad321.

α, β 不饱和羰基化合物在星际低温环境下的高效气相合成

周飞跃[1,2]，李昌茂[1]，黄勤文[1,2]，金钰舒[1,2]，杨学明[1,2,3]，李宏伟[1,2,*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，大连市沙河口区中山路 457 号，116023

[2] 中国科学院大学，北京市石景山区玉泉路 19 号（甲），100049

[3] 南方科技大学，深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055

*Email: lihw@dicp.ac.cn

乙醛（CH_3CHO）是一种不饱和的含氧复杂有机分子（complex organic molecules, COMs），在星际环境中丰度客观，例如在暗星云（dark cloud）TMC-1 中，乙醛相对于氢气的丰度高达 3.5×10^{-10}。乙醛也被认为可能是一系列更复杂的含羰基官能团的分子的潜在来源。CH·同时具有一个未成对电子和空轨道，这个特性使得 CH·容易发生插入和加成反应。在 TMC-1 中，次甲基自由基（CH·）相对于氢气的丰度高达 1.5×10^{-8}。在此环境中，CH·被认为是碳链增长反应的重要驱动反应物[1]。在本工作中，我们基于拉瓦尔喷管（*de* Laval nozzle）在实验室中模拟了星际低温环境[2]。在此条件下，我们使用脉冲激光光解-激光诱导荧光（PLP-LIF）技术测量了 CH·和 CH_3CHO 的反应速率系数，在反应温度为 26 K 时，反应速率系数高达 8.52×10^{-10} cm^3 $molecule^{-1}$ s^{-1}。随后我们通过真空紫外（VUV）光电离的反射式飞行时间质谱（ReTOFMS）对反应产物进行了表征，观测到了唯一的氢原子解离产物通道（$C_3H_4O + H$）。对该体系反应机理分析得到甲基乙基酮（$CH_3CH=C=O$）和丙烯醛（$CH_2=CHCHO$）两种产物。通过对同位素取代反应的产物质谱测量，我们得到了两种产物的分支比。星际化学模型进一步揭示了 CH·和 CH_3CHO 的反应是这两种不饱和羰基化合物在星际低温环境下的高效气相合成路径。

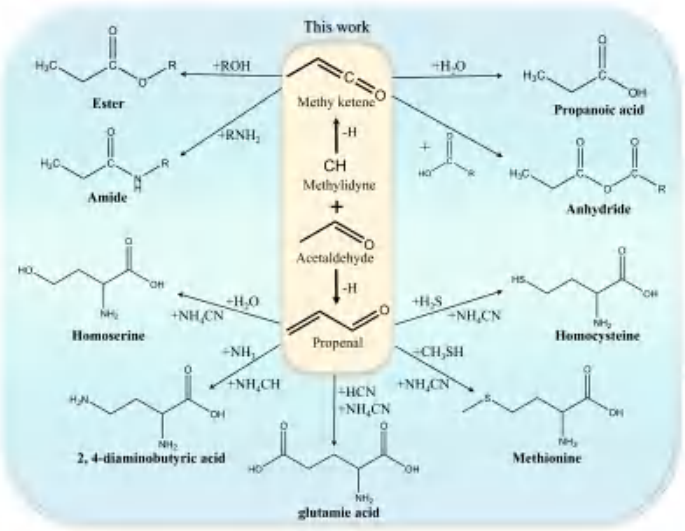


图1：α, β不饱和羰基化合物的低温合成路径和潜在应用

关键词：拉瓦尔喷管；星际低温环境；不饱和羰基化合物；高效气相合成

参考文献：

[1] Taniguchi, K.; Gorai, P.; Tan, J. *Astrophys. Space. Sci.* 2024, 369: 34.

[2] Zhou, F.; Ma, S.; Li, L. et al. *J. Chem. Phys.* 2025, 162: 094201.

低温下 S+HD 反应动力学研究

李煜[1]，张洪涛[1]，王黑龙[1]，焦志润[1]，肖春雷[1,*]，杨学明[1,2*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，化学反应动力学全国重点实验室，大连 116023
[2] 南方科技大学，理学院，先进光源科学中心，深圳，518055
*Email: chunleixiao@dicp.ac.cn，xmyang@dicp.ac.cn

星际空间中的复杂有机分子被认为是地球生命起源的潜在物质基础，而其中含硫分子在星际化学中扮演着尤为关键的角色。在众多星际含硫物种中，硫氢自由基（SH/SD）作为连接简单硫化物与复杂有机硫分子的关键中间体，其起源与演化路径已成为星际分子研究的重要课题。该自由基的紫外吸收光谱提供了独特的模型，这些模型可以用于预测星际介质中的化学反应[1]。利用交叉分子束-氢原子里德堡标记飞行时间谱装置，研究了在低温条件下（最低到 8K 左右），S+HD 反应生成 SH/SD 的反应机理。该反应是无势垒反应，在低温下仍然有较大的反应截面[2]。在 D+SH 与 H+SD 两个通道中均发现了特殊的散射峰，同时在 SD/SH($^2\Pi_{3/2,1/2}$)的微分截面结果中展示出自旋轨道态相关的结构。上述结果表明了该反应在低温下的特殊机理，揭示了这类反应本质。

关键词：硫氢自由基；交叉分子束；无势垒反应；微分截面

参考文献：

[1] Zhao D, Galazutdinov G A, Linnartz H, et al. Astronomy & Astrophysics, 2015, 579: L1.

[2] Lara M, Chefdeville S, Hickson K M, et al. Physical Review Letters, 2012, 109(13): 133201.

一种适用于反应散射的紧凑型离子透镜

张玉[1,3]，李世豪[2]，郭荣婧[1,3]，高治[2]，袁道福[2]，杨学明[3,4,5]，王兴安[1,3*]

[1] 中国科学技术大学，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026

[2] 合肥微尺度物质科学国家研究中心，安徽省合肥市金寨路 96 号，230026

[3] 合肥国家实验室，安徽省合肥市望江西路 5099 号，230088

[4] 中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号，116023

[5] 南方科技大学，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055

*Email: *xawang@ustc.edu.cn*

近年来，离子透镜技术与交叉分子束方法的结合，在基元反应动力学及光化学动力学实验研究中发挥着关键作用。通过对产物离子的速度聚焦，该技术在实验中可单次捕获产物的全角度、全量子态信息，进而精准提取其散射角分布与能量分布。获得的高分辨的实验结果在揭示产物生成的微观动力学细节，解析反应过渡态、分子电子态等化学反应关键信息中扮演着重要的角色。

随着研究深入，诸多反应的实验探索面临显著瓶颈。例如涉及大量吸热、高势垒的反应，其反应截面通常极小，导致反应信号极其微弱，大幅降低探测信噪比。如何突破这一限制、提升信号质量，正是解析此类反应微观机制的关键方向。早期离子透镜存在明显短板：直径偏大导致束源间距受限，直接引发信号衰减；在缩小尺寸时难以兼顾速度聚焦性能，无法满足研究对探测灵敏度与功能完整性的双重需求。

我们自主设计的离子透镜，其核心创新点在于：在确保产物离子速度聚焦功能的前提下，将透镜直径缩减至极限尺寸。其超紧凑结构可显著缩短束源间距，直接提升离子信号强度，有效解决小散射截面反应的微弱信号探测难题。该透镜能为低于势垒的量子隧穿反应研究提供“高分辨+强信号”的双重技术支撑，将助力相关领域实现实验精度与研究效率的突破。

关键词：离子透镜，交叉分子束，反应动力学

参考文献：

[1] D. W. Chandler; P. L. Houston J. Chem. Phys. 1987, 87, 1445

[2] Jim J. Lin; Jingang Zhou; Weicheng Shiu; Kopin Liu. Rev. Sci. Instrum. 2003, 74(4), 2495-2500

[3] Daofu Yuan; Shengrui Yu et al. Nature Chemistry. 2018, 10, 653-658

[4] Vikram Plomp; Zhi Gao; Sebastiaan Y. T.; van de Meerakker. Mol. Phys. 2020, 119(1-2)

[5] Shihao Li; Huang Jiayu et al. Nature Communications. 2024, 15, 1698

基于星际化学的激发态分子制备

温黎平[1]，李政蒯[1]，谢雨润[1,2]，韩杰[1]，肖越[1]，武文杰[1]，李梦阳[1]，

杨天罡[1,*]，杨学明[1,3]

[1]南方科技大学，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055

[2]深圳先进光源研究院，深圳市光明区新湖街道圳园路 268 号，518107

[3]中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市中山路 457 号，116023

*Email: yangtg@sustech.edu.cn

分子束实验是研究分子反应动力学的重要方法，分子束的量子态调控对于探究态-态反应的机理有着重要意义[1]。本研究通过分子斩波器结合温度可调的超声分子束发展了一套速度可调、脉冲宽度约为 6 μs 的窄脉宽分子束系统[2]。并在此基础上运用受激拉曼泵浦方法对 H_2 进行了振动激发，实现了超过 20%的全束激发效率[3]。同时，通过分别调制 Pump 与 Stokes 两束光的偏振，对于激发态 H_2(v=1,j=2) 实现了磁量子数（M=0/±2）的选择性锁定，并首次在激发态分子飞行 14cm 后探测到取向保持。此外，该方法还实现了 N_2(v=2) 态的泛频振动激发，并结合共振增强多光子电离（REMPI）检测来确定 N_2 $a''^1\Sigma_g^+$ 态的振动常数[4]。除了受激拉曼泵浦之外，本研究还发展了分子束条件下激发 O_2 至其电子激发态 $b^1\Sigma_g^+$(v=1)的技术，这一技术提供了单重态的 O_2 分子，在生物、大气、燃烧等一系列领域有着广泛的应用。这一系列态选择的分子束，结合激光冷却的低温离子阱技术[5]，可在态-态精度的基础上，开展不同碰撞能下的低温离子-分子反应动力学实验研究。

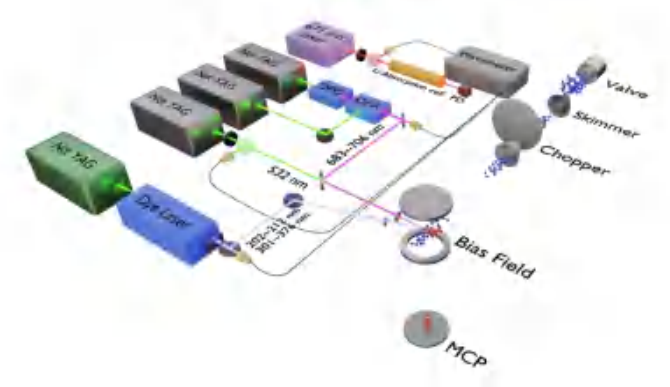


图1：分子量子态选择仪器装置示意图

关键词：量子态选择；低温化学反应；反应动力学

参考文献：

[1] Wang, Y.; Huang, J.; Wang, W.; et al.; *Science* 2023, 379 (6628): 191.

[2] Xie, Y.; Liu, H., Xiao, Y.; et al.; *Chin. J. Chem. Phys.* 2023, 36(3): 259.

[3] Xie, Y.; Han, J.; Wen, L.; et al.; *J. Phys. Chem. Lett.* 2023, 14 (51): 11603.

[4] Xiao Y.; Wen L.; Li, Z.; et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 2024, 15(46): 11767.

[5] Xiao, Y.; Wen, L.; Xie, Y.; .et al., *Rev. Sci. Instrum.* 2025 96(8): 085205.

Hydrogen-Bonded Complexes between HCN/HNC and HCl

Yanqi Du[1], Xiaoqing Z.[1,*]

[1]Department of Chemistry, Fudan University, 200433

*Email: xqzeng@fudan.edu.cn

Weakly-bonded molecular complexes serve as crucial bridges between isolated molecules and the condensed phase. The intermolecular interactions within such complexes influence the optical properties and kinetics of molecular systems, thereby possessing universal significance. Also, these complexes have been regarded as significant node in astrochemistry, particularly in the interstellar clouds or places at higher molecular density, such as the atmosphere. Hydrogen bond plays a vital role in molecular complexes. In this context, hydrogen cyanide (HCN) and its isomer, hydrogen isocyanide (HNC), are important interstellar molecules that exhibit behaviors analogous to hydrogen halides. Due to their notable capability to participate in hydrogen bonding, these molecules and their clusters have attracted considerable attention from the scientists. Here, we report the formation of a series of hydrogen-bonded complexes involving HCN/HNC and HCl — HCN/HNC···HCl and HCN/HNC···HCl···HCl in solid Ar-matrixes at 6 K, generated through the photolysis of *N*-chloromethylamine and *N,N*-dichloromethylamine. IR spectroscopic results indicate that both HCN and HNC function as hydrogen bond acceptors. Quantum chemical calculations reveal that the 1:1 complexes adopt a nearly linear geometry, resembling that of the HCN dimer. However, the structures of 1:2 complexes deviate from the cyclic structure typically observed in pure hydrogen halide or hydrogen pseudohalide trimers, where each monomer acts as both a hydrogen bond donor and an acceptor. Instead, an open structure emerges that precludes hydrogen bonding between the terminal HCl and HCN/HNC. Our findings enrich the cluster patterns governing interactions between hydrogen halides and hydrogen pseudohalides, and further illustrate the strong hydrogen-bond acceptor character of the CN and NC groups in HCN and HNC.

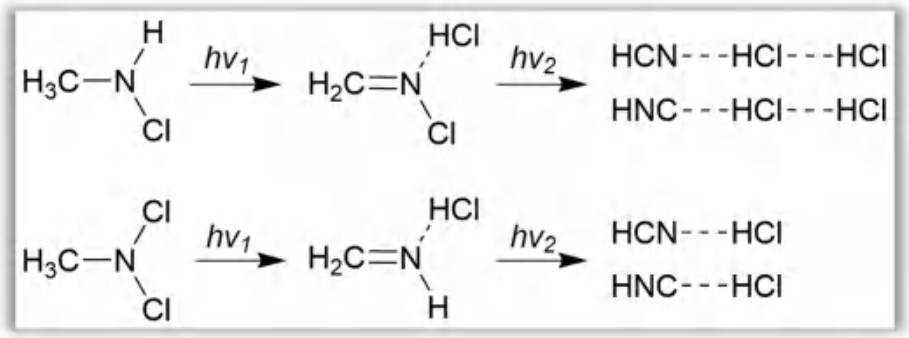


Fig. 1 Generation of HCN/HNC···HCl and HCN/HNC···HCl···HCl complexes.

Keywords：Hydrogen Bond, Interstellar molecule complex, Hydrogen (iso)cyanide

References：

[1] Jiang, J.; Lu, B.; Zhu, B.; Li, X.; Rauhut, G.; Zeng, X. *J. Phys. Chem. Lett.* 2023, 14: 4327.

[2] Perkins, M. A.; Tschumper, G. S. *J. Phys. Chem. A* 2022, 126: 3688.

[3] Potapov, A. *Mol. Astrophys.* 2017, 6: 16.

Quantum Wave Packet Study on the Dissociation Dynamics of Three-Atom Systems in High-Temperature Celestial Environments

Yichen Ao[1], Jun Li[1,*]
[1]School of Chemistry and Chemical Engineering & Chongqing Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Chongqing University, Chongqing 401331, China

In extreme astrophysical environments such as shock interstellar clouds, protostellar disks and exoplanetary atmospheres, the dissociation dynamics of some three-atom systems under high-temperature conditions play a key role in the chemical evolution process[1]. To gain a deeper understanding of the microscopic dynamic nature of these reactions at high temperatures, we use the time-dependent quantum packet (TDWP) method to study its fundamental mechanism[2], involving major elements such as hydrogen, oxygen, carbon, and nitrogen, which are the "starting points" for the formation of more complex molecules.

By propagating quantum wave packets on precise multi-dimensional potential energy surfaces, this method can analyze state-to-state dissociation pathways, energy-dependent reaction probabilities, and temperature-dependent reaction rates within the framework of full quantum mechanics[3]. It can provide crucial assistance for non-equilibrium effects, vibration and rotational coupling, as well as reaction mechanisms that are difficult to capture by classical or approximate methods.

This method is universal and can be extended to general three-atom systems, providing a theoretical basis for understanding the chemical evolution and molecular dissociation processes in high-temperature celestial environments. It is of great significance for astrochemical modeling and the interpretation of observational data.

Keywords： dissociation dynamics, high-temperature, TDWP, reaction mechanisms

References：

[1] S. Yamamoto. Editorial: Springer. 2017, 614:
[2] G. Balint-Kurti. Int. Rev. Phys. Chem. 2008, 27: 507.
[3] N. Sathyamurthy.; S. Mahapatra. Phys. Chem. Chem. Phys. 2021, 23: 7586.

Ar+HF 体系转动传能动力学研究

步允霆[1,3]，杨东铮[2,*]，谢代前[1,3*]

[1] 南京大学化学化工学院，江苏南京，210093
[2] 中国科学技术大学精准智能化学重点实验室，安徽合肥，230026
[3] 合肥国家实验室，安徽合肥，230026
*Email: dzyang@ustc.edu.cn，dqxie@nju.edu.cn

在星际化学、大气化学、超冷化学与化学激光等领域，分子间非弹性碰撞产生的传能过程都是重要的化学物理过程。氟化氢分子作为常见的星际分子与氟化氢激光器的载体，其与氩原子的传能动力学受到了较为广泛的关注。

早期文献报道了HF振动初态与第一振动激发态的转动传能的积分截面，包括态-态结果与总截面结果，但都只有相对值。Krems 等人使用离心突变近似(Centrifugal Sudden Approximation, CSA)方法，报道了 HF $(v=0, j=0)$ 在低碰撞能下的转动激发积分截面；Yang 等人使用非含时紧耦合(Time Independent Close-Coupling, TICC)方法计算了 Ar+HF 的纯转动传能和振动弛豫的态-态积分截面与传能速率常数，但均未给出微分散射截面。

最近，我们基于 CCSD(T)高精度全维从头算 ArHF 体系势能面，使用 TICC 方法计算了 $\mathrm{Ar+HF}(v=0\sim3, j=1)\rightarrow\mathrm{Ar+HF}(v'=0\sim3, j'=0,2,3,4)$ 在 350cm^{-1} 和 1900cm^{-1} 碰撞能下的纯转动传能动力学的态-态总微分散射截面与分波分解的微分截面，并同时使用准经典轨线(Quasi Classic Trajectory, QCT)方法进行了计算，得到了与 TICC 相似的结果。

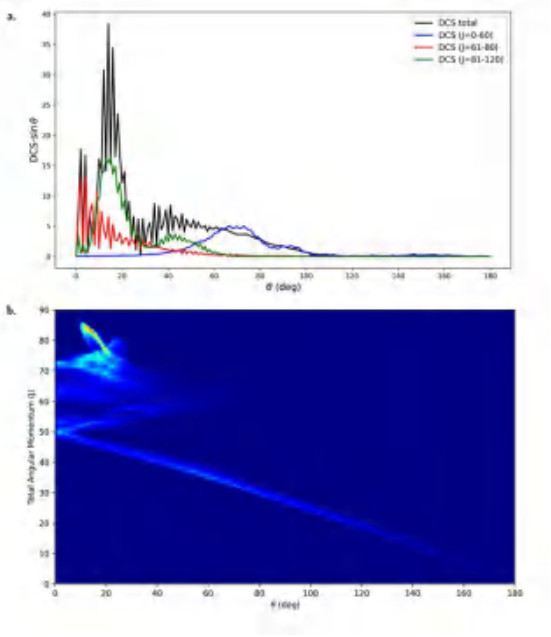


图1：a. TICC计算的微分散射截面与分波的微分截面。b. QCT计算的偏转函数。

关键词：量子动力学；转动传能；准经典轨线

低温激发态离子–分子反应的动力学研究

彭永旭[1]，肖越[1]，温黎平[1]，宋宗傲[1]，韩杰[1]，
谢雨润[1,2]，杨天罡[1,*]，杨学明[1,3]

[1] 南方科技大学化学系，先进光源科学中心，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518005

[2] 深圳先进光源研究院，广东省深圳市光明区新湖街道圳园路 268 号 3 号楼 3-6 层，518107

[3] 中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市中山路 457 号，116023
*Email: yangtg@sustech.edu.cn

恒星及其行星诞生于星际分子云中，这类分子云具有低温和低分子密度的特点，往往不利于中性分子进行反应。但宇宙射线及其它恒星发射出的紫外光会使中性原子或分子发生电离，所产生的离子与中性分子的反应大部分为无势垒反应，它们丰富了星际云中物质的组成，也推动了星体演化。为深入探究其动力学过程，我们搭建了一套结合离子阱与态选择、速度可调的超声分子束的实验装置以进行量子态和碰撞能同时可控的离子分子反应研究[1,2]。通过激光直接冷却 Be^+离子，能将其平动温度冷却至 mk 量级。而调节激光失谐，能够对特定量子态的 Be^+与中性分子反应进行研究，如测量 $Be^+(^2P_{3/2})$ + HD 反应速率常数，并结合飞行时间质谱确认产物 BeD^+/BeH^+的分支比[3]。还可以探究复杂分子离子 BeD^+的进一步反应，丰富离子分子反应数据库，以发展更先进的动力学理论[4]。此外，被激光冷却的 Be^+离子还可以协同冷却在星际介质中尤为重要的 C^+离子[5]，我们结合分子束装置研究其与不同量子态 H_2 分子的反应，结果证明 H_2 分子的振动激发能显著增强该体系的反应性。本研究为离子-分子反应动力学提供了一种新方法，并进行了诸多和星际过程相关的化学反应，对星际化学及低温化学反应等研究具有重大意义。



图 1：离子阱与超声分子束联合装置

关键词：量子态调控；离子–分子反应；离子阱；激光冷却

参考文献：

[1] Xiao, Y.; Peng, Y.; Chen, L.; Li, C.; et al. *Commun. Phys.* **2024**, *7* (1), 423.

[2] Xiao, Y.; Wen, L.; Xie, Y.; Han, J.; et al. *Rev. Sci. Instrum.* **2025**, *96* (8): 085205.

[3] Peng, Y.; Wang, Z.; Xiao, Y.; Song, Z.; et al. *J. Chem. Phys.* **2025**, *163* (6): 064308.

[4] Peng, Y.; Li, J.; Song, Z.; Li, M.; et al. *JACS Au* **2025**, *5* (9), 4260-4267.

[5] Yang, T.; Li, A.; Chen, G. K.; Yao, Q.; et al. *Sci. Adv.* **2021**, *7* (2), eabe4080.

Fe(100)金属表面吸附氢原子渗透进入次表层及体相过程

吴棚举[1]，傅碧娜[1,*]，张东辉[1,*]

[1]大连化学物理研究所，辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号，116023
*Email: bina@dicp.ac.cn

H_2 在 Fe(100)表面的解离是一个极易发生的过程，解离后的氢原子在表面经过迁移扩散后有概率由金属表面的稳定吸附位点进入金属块体的次表层，进一步由次表层扩散到体相中去，与金属内部的缺陷或原子相互作用使得金属键断裂，发生氢脆现象。

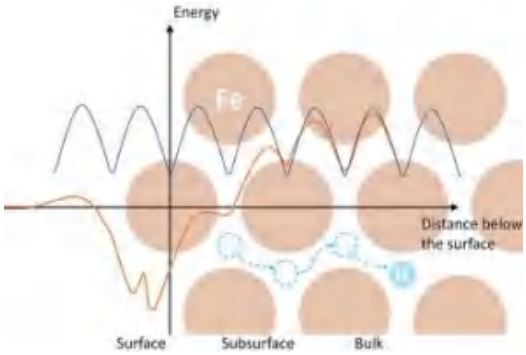


图 1：实际扩散能量曲线(橙色)与块体内扩散能量曲线(蓝色)对比示意图[1]

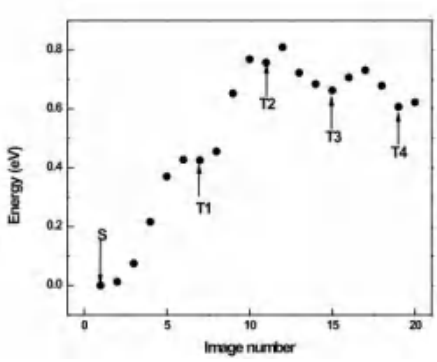


图 2：表面 H 原子进入次表层最小能量路径示意图[2]

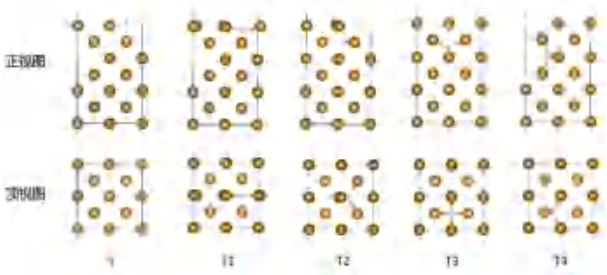


图 3：优化后的表面(S)以及不同次表层(T1-T4)的稳定间隙位点示意图[2]

在氢原子进入次表层的过程中，氢原子的位置越深入，势能的变化会越来越接近体相内的扩散过程,H 进入次表层的过程会朝着表面 Fe 原子构成的四面体间隙和八面体间隙位逐层向下渗透，最小能量路径的扩散能量变化如图 2 所示。我们正在通过机器学习方法构建该体系的次表层势能面，期待获得更详细的能量和动力学信息。

关键词：氢脆；扩散；金属表面；次表层

参考文献：

[1] : Lukas M.; Asif I. B.; Stefaan C.. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences.* 2025, 50:3, 275-295.

[2] :A. Boda,Sk Musharaf Ali,K. T. Shenoy,S. Mohan,J. Phys. Chem. C 2019, 123, 23951−23966.

Photodissociation of carbon dioxide in singlet ground electronic state

JianJun Qi[1], Yan-Lin Fu[1], Yafu Guan[1], Dong H. Zhang[1], Bina Fu[1,*]

[1]Dalian Institute of Chemical Physics
Chinese Academy of Sciences, 457 Zhongshan Road, Dalian 116023
*Email: bina@dicp.ac.cn

Carbon dioxide (CO_2) is the main component of the atmospheres of Mars, Venus, and the Hadean Earth. Its photoabsorption screens solar UV light, determining altitude-dependent photolysis rates, and its concentrations and infrared absorptions make it a powerful greenhouse gas. CO_2 photodissociation is the basis of these atmospheres' photochemistry and is the primary source of carbon monoxide (CO) and O_2. Although the initially high concentration of CO_2 during Earth's Hadean era decreased as carbonate rocks accumulated, CO_2 continued to be a prominent atmospheric gas, enhancing surface temperature and attenuating UV light.[1] In order to study the photodissociation of carbon dioxide, we constructed potential energy surfaces (PESs) of the ground state $1^1A'$ and first excited state $2^1A'$ of singlet-state CO_2.We calculated energy points using high-accuracy ab initio methods by the MOLPRO 2018 program package and constructed adiabatic and diabatic potential energy surfaces for these two states using the ansatz approach based on these points. The PESs were constructed using the Diabatization by Ansatz developed by Guan et al. [Phys. Chem. Chem. Phys. 21, 14205(2019)].

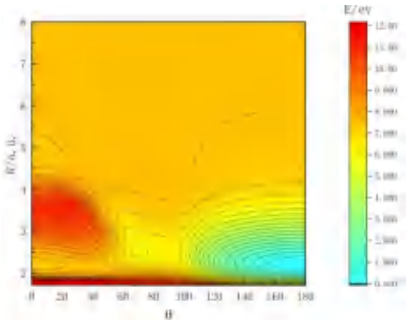


Fig. 1 shows the potential energy surface as a function of C-O distance r and OCO angle, with all other degrees of freedom fully optimized

Keywords：photodissociation, carbon dioxide，Quasi-Classical Trajectory

References：

[1] Schmidt, J.A., M.S. Johnson, and R. Schinkehang. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2013, 110:44.

[2] Guan, Y., et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 21:14205.

NO 在 Cu(111)表面解离的全维势能面构建和动力学研究

彭天泽 [1]，傅碧娜 [2,*]

[1] 大连理工大学物理学院，大连，116023
[2] 中国科学院大连化学物理研究所 1113 组，大连，116023
* Email: bina@dicp.ac.cn

摘要正文：气相分子与过渡金属表面的解离吸附在多相催化和腐蚀等多界面过程中发挥着很重要的作用。1 目前有大量的实验和理论致力于研究一氧化氮分子在金属表面反应的解离动力学机理。我们基于约 46000 个 DFT 能量点，通过神经网络(NN)拟合方法构建了 NO 在静态表面 Cu(111) 上解离吸附的全维全域势能面，拟合误差仅为约 12.2meV。基于该全新的势能面，我们利用准经典轨线(QCT)方法和量子含时波包方法计算了 NO+Cu(111) 体系的解离几率，发现其具有一定的量子效应。此外，我们利用 QCT 方法研究了 NO 分子的入射能量、振动激发、转动激发和入射角度对解离概率的影响。结果表明振动激发比增加等量的平动能更能有效地促进 NO 在 Cu(111) 表面的解离吸附反应，而转动激发对解离吸附反应的影响很小。

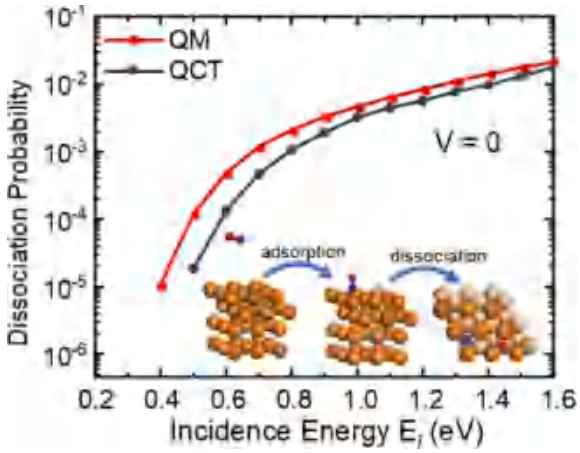


图1：六维含时波包法和准经典轨线方法计算的解离几率与碰撞能 E_i 的关系曲线

关键词：神经网络；势能面；量子含时波包法；准经典轨线；

参考文献：

[1] Peng, T. Z.; Wu, P. J.; Liu, T. H.; Fu, Y. L.; Han, Y. C.; Zhang, D. H.; Fu, B. N. J. Phys. Chem. C 2024, 128: 18255.

基于 FI-NN 基态势能面与 QCT 的甲醇（CH_3OH）光解模拟：O + CH_4 通道可达性、通道选择与稳健性评估

李俊龙[1]，傅碧娜[1,*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，大连市中山路 457 号，116023
*Email: bina@dicp.ac.cn

摘要正文：甲醇（CH_3OH）是最简单的含氧有机分子之一，在大气与星际介质中均是重要的挥发性有机物；其光解动力学与自由基反应对燃烧化学、环境化学与天体化学均具有基础意义。其光解通常由 UV/VUV 吸收触发，经由圆锥交叉发生非绝热内转换（IC）落回基态 S_0，形成超热基态分子，随后在分子内振动能量再分配（IVR）主导下沿多通道解离。我们关注在基态势能面（PES）上，由超热 CH_3OH 逆向解离生成 O + CH_4 的动力学可达性与通道选择效应。为此我们基于 *ab initio* 计算了 24 万的原始数据点，并通过 1/r 欧氏距离覆盖采样将数据精简至约 16 万点。接着使用 FI-NN 方法模拟全维基态势能面，同时保持精度（能量 RMSE = 35.12 meV）。在该势能面上进行结构优化和频率计算，得到的结果符合预期，证明了势能面的可靠性。下一步利用该势能面运行 QCT，初始结构设为 CH_3OH，以振动能的形式给初始构型加入 156 kcal·mol^{-1}的能量模拟光解。初步验证结果显示 O + CH_4 通道占比为零，下一步工作聚焦于继续加热初始构型以及添加数据点来提高 O + CH_4 产率，选择更符合物理直觉的初态分布，并且对 PES 可信度再次进行强检验，以期获得更准确的结果。

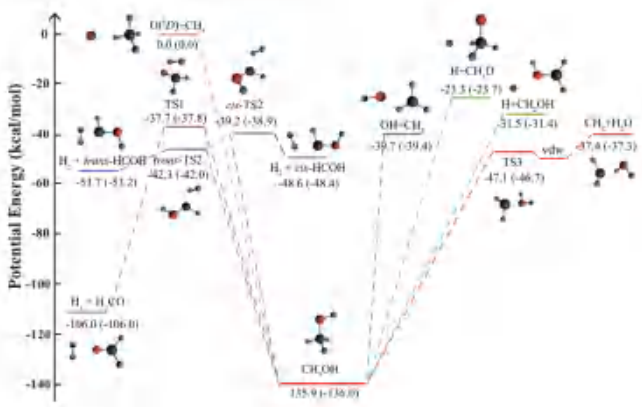


图1：势能面示意图

关键词：势能面；准经典轨线；甲醇光解

参考文献：

[1] Jiayue Yang, Kejie Shao, Dong Zhang, Quan Shuai, Bina Fu, Dong H. Zhang, and Xueming Yang

The Journal of Physical Chemistry Letters 2014 5 (18), 3106-3111

Competing Quantum Tunneling Processes of Heavy and Light Particles in Isocyanic Acid Radical Anions

Jingjing Tang, Wenbin Fan, Lina Wang*, Xin Jiang, Beibei Sun, Yangyu Zhou, Wei Fang*, Xiaoqing Zeng and Mingfei Zhou*

Department of Chemistry, Fudan University, 200433
*Email: lina_wang@fudan.edu.cn (L. W.), wei_fang@fudan.edu.cn (W. F.)
and mfzhou@fudan.edu.cn (M.Z.)

Quantum tunneling is known to be mass dependent. Here we report an unexpected mass effect on tunneling reactions in isocyanic acid radical anions ($HNCO^{\bullet-}$), which exhibit negative electron affinities. The *cis*- and *trans*-isomers of $HNCO^{\bullet-}$ were generated in a solid neon matrix and their interconversion and electron-detachment tunneling kinetics were investigated using infrared absorption spectroscopy. The results reveal that electron tunneling, which involves some degree of nuclear motion of $HNCO^{\bullet-}$ to neutral HNCO, occurs at a slower rate than the *cis*-to-*trans* isomerization of $HNCO^{\bullet-}$, with the latter following a distinct bond angle inversion pathway driven by the heavy carbon atom. This contrasts to the typical dominance of light hydrogen atom tunneling in *cis-trans* isomerization systems. These findings are rationalized by instanton theory calculations. Our model, which explicitly includes the neon matrix via a QM/MM approach, reveals that the carbon-driven pathway is favored by a lower barrier and shorter tunneling distance.

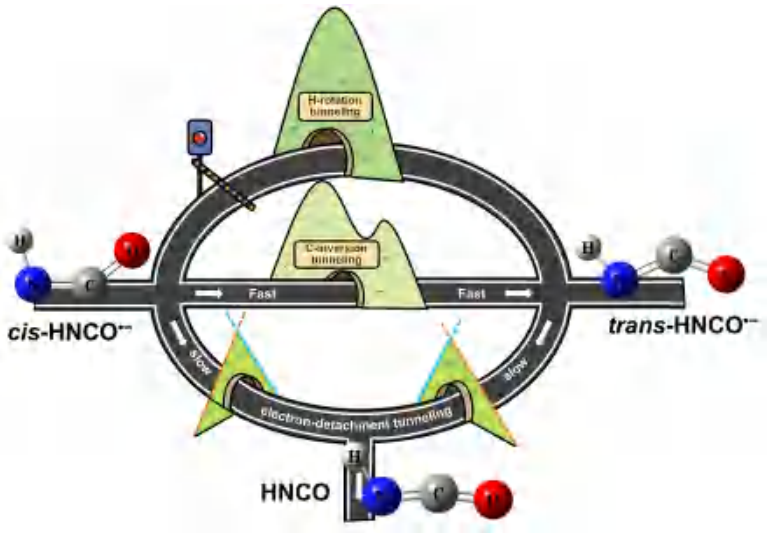


Fig. 1 Competing tunneling processes scheme of isocyanic acid radical anions

Keywords: competing quantum tunneling, isocyanic acid radical anions, *cis*-to-*trans* isomerization, electron-detachment tunneling

H_2S $3^1A'$ 态的光解离动力学：双重交叉诱导势垒的主导作用

李馨[1]，王俊彦[1]，陈俊杰[2]，韩山雨[3,4*]，胡茜茜[5,6*]，谢代前[1,6*]

[1] 南京大学化学与化工学院理论与计算化学研究所，江苏南京，210023
[2] 重庆科技学院化学与化学工程学院，重庆，401331
[3] 南京大学地球科学与工程学院关键地球物质循环前沿科学中心，江苏南京，210023
[4] 南京大学同位素效应研究中心，江苏南京，210023
[5] 南京大学匡亚明学院，江苏南京，210023
[6] 合肥国家实验室，安徽合肥，230088
*Email: shhan@nju.edu.cn, xxhu@nju.edu.cn, dqxie@nju.edu.cn

H_2S 作为星际介质中含量最丰富的含硫分子之一，其紫外光解离产生的 SH 和 H_2 等碎片参与构建完整的星际化学网络。实验上对 H_2S 的真空紫外光解做了全面的探索，但是精确的量子动力学仍局限于最低的两个 $1^1A''$态。本研究基于 icMRCI[1]+Q[2] 的从头算数据点与基于绝热能量的神经网络透热化方案[3]构建了 H_2S 的最低的 4 个 $1^1A'$态的透热势能矩阵。并进行了 $3^1A'$的量子动力学模拟，成功重现了吸收光谱与实验上 H+SH(X/A)通道平行方向的内能分布。进一步的轨线面跳跃的研究揭示了：$2^1A'$与 $3^1A'$之间双交叉诱导 $2^1A'$绝热势能面存在一个双势垒的盆地结构，该结构在动力学过程中将解离路径约束为沿解离坐标的定向逃逸通道，导致多数轨线在逃离势阱后也远离了 $1^1A'$和 $2^1A'$的线性交叉，促进 SH(A)产物的生成同时抑制 SH(X)产物。此前的研究多集中在单个锥形交叉导致的特殊拓扑结构（如局部势垒或势阱）对于反应动力学的影响，本工作提出了一种新的机制：高激发态之间的双重交叉共同塑造势能面的拓扑结构，形成的双势垒盆地诱导产物定向逃逸，控制产物分支比。这种双重交叉协同作用的非绝热过程直接影响产物动力学的机制为理解高激发态的光解动力学提供了一种全新框架。

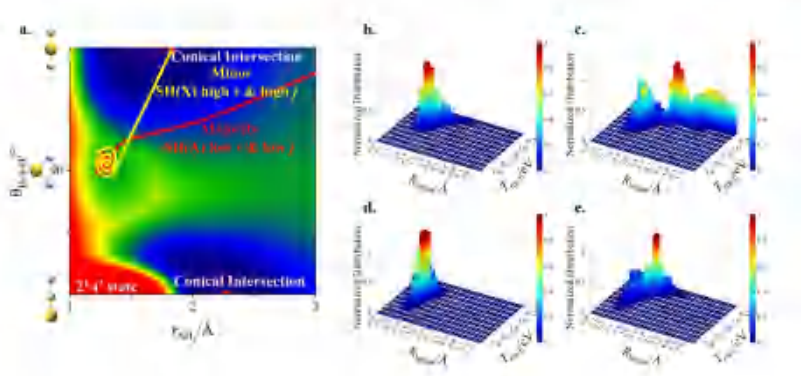


图1：(a) H_2S的$2^1A'$势能面与生成SH(X)、SH(A)产物的轨线示意图**; (b)&(c)** SH(X)和SH(A)的轨线距H-S-H线性构型最近时的双原子的转动能量与R的相关图； **(d)&(e)** OH(X)和OH(A)的轨线距H-O-H线性构型最近时的双原子的转动能量与R的相关图。

关键词：高精度势能面；激发态光解动力学机制；双重交叉诱导势垒；取向依赖性解离

参考文献：

(1) Knowles, P. J.; Werner, H.-J. Internally contracted multiconfiguration-reference configuration interaction calculations for excited states. *Theor. Chim. Acta.* **1992**, *84* (1), 95–103.

(2) Langhoff, S. R.; Davidson, E. R. Configuration interaction calculations on the nitrogen molecule. *Int. J. Quantum Chem* **2004**, *8* (1), 61–72.

(3) Li, C.; Hou, S.; Xie, C. Constructing diabatic potential energy matrices with neural networks based on adiabatic energies and physical considerations: toward quantum dynamic accuracy. *J. Chem. Theory Comput.* **2023**, *19* (11), 3063–3079.

光化学反应装置的研制

——连接微观态态反应与宏观同位素组成的桥梁

孙翔[1]，帅全[1]，袁开军[1*]

[1] 中国科学院大连化学物理研究所，大连，116023
*Email: kjyuan@dicp.ac.cn

摘要：星际环境中同位素异常信号的起源问题至今仍存在争议，这制约了人们对太阳系演化过程的深入理解。争议主要源于现有同位素分馏理论的不完善。该理论建立在体系处于热平衡的基础上，由此推导出经典的质量依赖分馏规律。然而，星际环境中可能存在大量非热平衡过程，对基于平衡假设的理论构成了挑战。近年来，化学反应实验研究已深入到态态反应层面，揭示出许多违背经典同位素分馏理论前提的微观机制，例如非绝热过程等。这些过程很可能是导致观测到的同位素异常的关键因素。然而，现有用于态态反应研究的实验装置（如离子成像）难以收集样品以进行同位素组成测定，且其样品量比同位素分析所需低三个数量级以上，严重阻碍了从微观机理到宏观同位素特征的关联研究。为突破态态反应实验成果在解释同位素异常中的应用壁垒，亟需研制一套新型光化学反应装置（图 1）。该装置将能够系统研究光波长、气体组分、气压等变量对反应路径的影响，并收集足够量的气态与固态产物，用于后续同位素分析。通过结合已知的态态反应机理，研究碳、氮、氢、氧、硫等同位素体系在不同条件下的分馏行为，有望为建立更完备的同位素分馏理论提供实验依据，进而深入探索星际环境中同位素异常信号的来源。

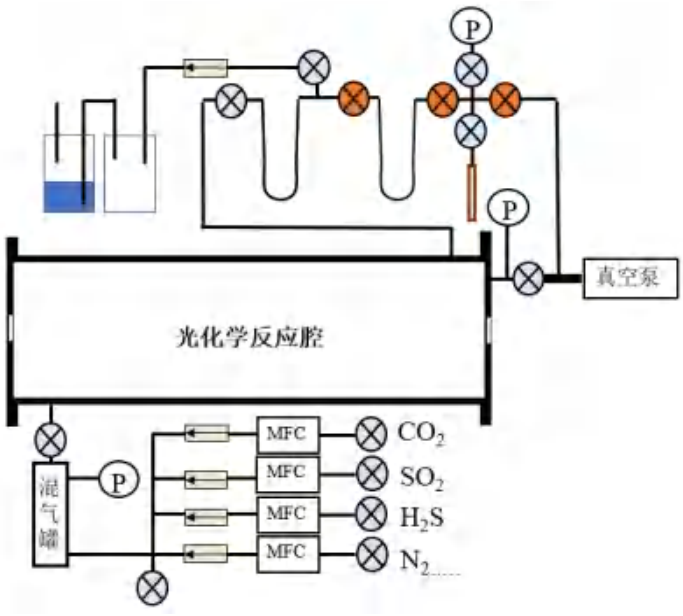


图1：反应装置设计图

关键词：同位素异常；态态反应；装置研发

SO_2的C态光解非绝热动力学研究

徐逸菲[1]，胡茜茜[1,2]，谢代前[1,2]，韩山雨[1*]

[1]南京大学，南京，210023

[2]合肥国家实验室，合肥，230088

*Email: shhan@nju.edu.cn

SO_2的C态光解被认为是产生硫同位素质量无关分馏(S-MIF)的关键反应。通过吸收太阳辐射能量, SO_2分子可以形成激发态,其后续的分解或转化过程可能会导致特定同位素的选择性分馏,从而产生S-MIF信号。然而,目前对于这一过程中的确切反应路径、激发态的寿命、以及它们如何影响最终的同位素分馏效应,仍缺乏充分的理解。

针对SO_2光解过程的分子束实验表明,在$SO(^3\Sigma^-)+O(^3P)$的反应通道中,可能存在多个非绝热跃迁通道,包括C̃态与X̃态之间的避免交叉、C̃态与D̃态之间的锥型交叉,以及与排斥三重态之间的自旋-轨道耦合。现有的量子动力学模型尚未全面考虑所有这些非绝热通道,导致对SO_2光解机理的认识仍不明确。

为了更准确地描述SO_2光解过程中的非绝热动力学,本研究采用了一种新颖的基于绝热能量拟设的策略,系统处理了C̃态与X̃态之间的非绝热耦合,并在此基础上构建了SO_2分子C̃态的透热势能矩阵。这一新方法有望更全面地考虑各种非绝热效应,为深入理解SO_2光解机理及其对S-MIF的影响提供重要的理论基础。

关键词：非绝热动力学；光解反应；同位素效应

参考文献：

基于光腔色散光谱的高精度气体稳定同位素探测

李进科[1,3#]，王进[2#]，尹睿恒[2]，黄琪[2]，谈艳[1,2*]，胡常乐[2]，孙羽[4]，胡水明[1,2,3*]

[1] 合肥国家实验室，合肥，230088；[2] 中国科学技术大学，合肥微尺度物质科学国家研究中心，合肥，230026；[3] 中国科学技术大学，化学动力学国家重点实验室，合肥，230026；[4] 深圳先进光源研究院，深圳，518107
*Email: tanyan@ustc.edu.cn, smhu@ustc.edu.cn

摘要：气体稳定同位素丰度比值（如 $^{13}C/^{12}C$、$^{18}O/^{16}O$ 和 $^{17}O/^{16}O$）的精确测量对于大气氧化[1]、碳源碳汇和古气候重建至关重要[2]。传统的高精度测量手段依赖于同位素比质谱仪（Isotope ratio Mass Spectroscopy，IRMS）。商用的双通道 IRMS 仪器在 $^{13}C/^{12}C$ 与 $^{18}O/^{16}O$ 比值测量中精度通常优于 0.1‰，然而，IRMS 存在诸多局限：设备昂贵、分析耗时长、破坏样品且需预处理，比如：IRMS 在测量 CO 中 $^{17}O/^{16}O$ 比值时，因 $^{12}C^{17}O$ 会受同质异位素 $^{13}C^{16}O$ 干扰，需将 CO 转化为 O_2 后再检测，这一过程步骤繁琐且会引入误差。IRMS 的局限性推动了激光光谱同位素比值探测技术的发展。激光光谱方法成本低、可原位检测、不破坏样品，有着天然规避同质异位素干扰的优点。本研究提出一种新的气体稳定同位素比值探测方法：双激光锁频的腔模色散光谱（Dual wavelength-Cavity Mode Dispersion Spectroscopy，DW-CMDS[3]），CMDS 是从光腔模式的频率信息获得色散谱，从而降低了对检测系统非线性的敏感性[4]。此外，双激光锁频的双线探测技术，对两个跃迁谱线同时测量，可以消除共模噪声的影响（如压力、温度等因素）。基于以上优点，利用此方法对同位素比值 R 值和 δ 值的探测可以实现 0.1‰的测量精度。

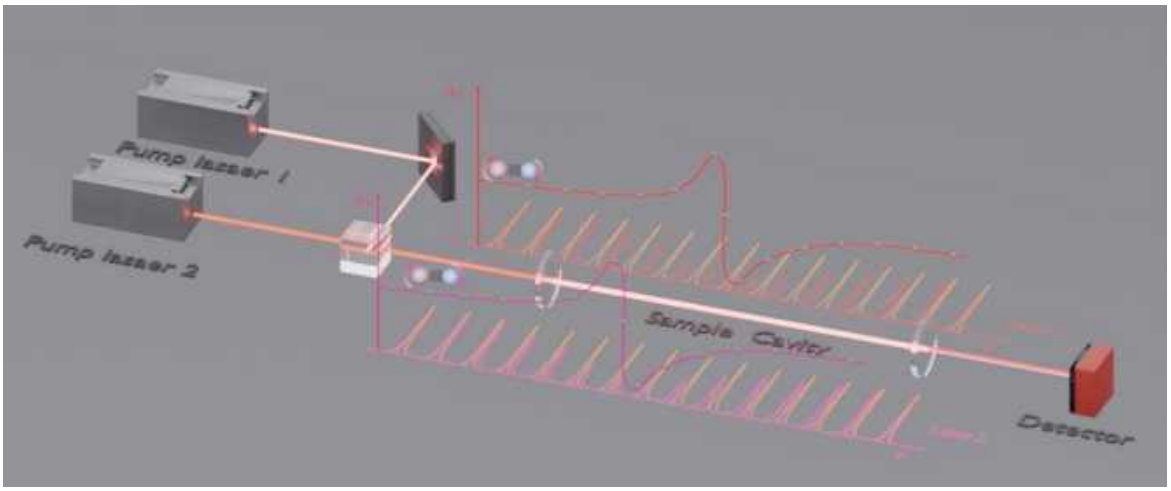


图1：双波长腔模色散光谱（DW-CMDS）的示意图

关键词：腔模色散光谱（CMDS）；一氧化碳（CO）；气体稳定同位素

参考文献：

[1] THIEMENS, Mark H., et al. *Science*, 1995, 270.5238: 969-972.

[2] BAO, Huiming, et al. *Nature*, 2008, 453.7194: 504-506.

[3] LI, Jin-Ke, et al. *Science Advances*, 2025, 11.38: eadz6560.

[4] CYGAN, Agata, et al. *Optics Express*, 2015, 23.11: 14472-14486.

热核中丙酮的大样本观测研究

张霞[1,2,3*]，李小虎[1,2,3*]，寇志平[1]

[1]中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐市新市区科学一街 150 号，830011
[2]射电天文与技术全国重点实验室，北京市朝阳区大屯路甲 20 号，100101
[3]新疆射电天体物理重点实验室，科学一街 150 号，乌鲁木齐 830011
*Email: zhangx@xao.ac.cn; xiaohu.li@xao.ac.cn

丙酮（CH_3COCH_3）是一种在宇宙中广泛存在的星际分子，是研究热核化学的重要示踪剂。我们利用 ALMA 3 mm 谱线观测数据，对 60 个热核区域的丙酮及其前体乙醛（CH_3CHO）进行了谱线巡测。其中，在 16 个热核中成功检测到丙酮。通过 XCALSS 软件计算得出，其转动温度范围为 89 至 175 K，柱密度分布在$(0.9\text{-}34)\times10^{16}$ cm^{-2} 区间。在空间分布上，丙酮与乙醛的分布具有相似性，均集中于热核区域，但丙酮表现为更致密的空间分布，而乙醛则显示出更为延展的空间轮廓。结合既往研究，发现丙酮与乙醛的柱密度之间存在强正相关性（r=0.82），表明二者在形成机制上存在密切的化学关联。通过与模型比较发现，丙酮与甲醇柱密度比值的预测值普遍高于观测数据，这种差异表明当前化学网络可能未充分考量丙酮的消耗路径，或模型中存在潜在物理条件的缺失。本研究的大样本观测数据为此提供了明确的观测约束，巩固了丙酮作为热致密区复杂有机化学可靠示踪剂的作用。

关键词：天体化学；星际分子；恒星形成区

参考文献：

[1] Zhang, X.; Li, X.; Kou, Z. MNRAS, 2025, under revision

[2] Liu, T.; Evans N.; Kim, K. et al., MNRAS, 2020, 496: 2790

[3] Qin, S.-L.; Liu, T.; Liu, X. et al., MNRAS, 2022, 511: 3463

[4] Chen, Y., Garrod, R. T., Rachid, M. et al., A&A, 2025, 696: A198

反射星云 NGC 2023 在 3 mm 波段的谱线巡测研究

马蓉[1]，李小虎[1,2,3*]

[1] 中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐市科学一街 150 号，830011
[2] 新疆射电天体物理重点实验室，新疆乌鲁木齐市科学一街 150 号，830011
[3] 射电天文与技术国家重点实验室，北京市朝阳区大屯路甲 20 号，100101
*Email: xiaohu.li@xao.ac.cn

NGC 2023 是研究最多的反射星云之一。多环芳香烃（PAHs）特征光谱在反射星云中的首次发现便是在此星云中[1-3]。然而，PAHs 在此类天体中是如何形成的不得而知。为深入探究 PAHs 的形成机制，本研究基于紫金山天文台 13.7 米毫米波射电望远镜，首次对反射星云 NGC 2023 开展了 3 mm 波段（84.5–115.8 GHz）的谱线巡测。此次谱线巡测总共探测到 12 种分子（26 个跃迁），分别为：*c*–C_3H_2、C_2H、CN、HCN、HNC、HNCO、N_2H^+、HCO、HCO^+、SO、CS 和 CO。其中，*c*–C_3H_2、C_2H、HNCO 和 N_2H^+是首次在该星云中被探测到。基于局部热动平衡假设，推导了所探测分子的激发温度、柱密度和相对于 H_2 的丰度。同时，还获得了该源中 [^{12}C]/[^{13}C] 同位素丰度比。此外，利用天体化学代码 NAUTILUS 模拟了相关分子的化学演化过程。本研究结果将为探寻小分子（如 *c*–C_3H_2 和 C_2H）与 PAHs 之间的化学联系提供线索。

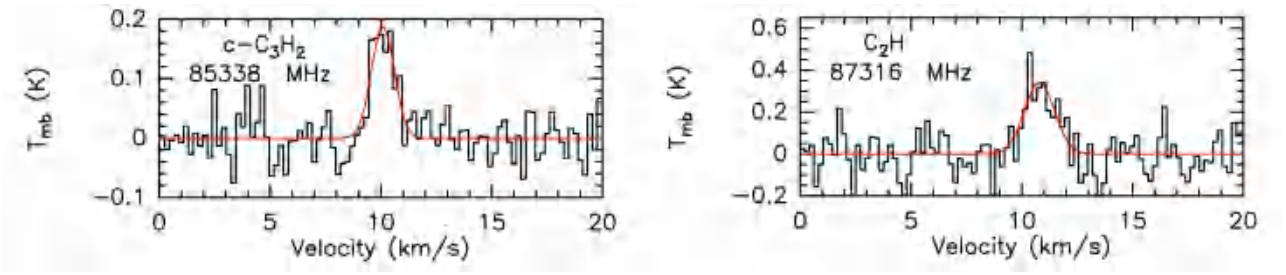


图 1: 使用紫金山天文台 13.7 米毫米波射电望远镜对 NGC 2023 的观测结果，黑色实线表示观测到的 c-C_3H_2 和 C_2H 分子（在该源中首次发现），红色实线表示高斯拟合结果。

关键词：天体化学；星际介质；分子谱线；反射星云 NGC 2023

参考文献：

[1] Sellgren, K. 1984, ApJ, 277, 623.

[2] Leger, A., & Puget, J. L. 1984, A&A, 137, L5.

[3] Sandell, G., Mookerjea, M., Güsten, R., et al. 2015, A&A, 578, A41.

富碳 AGB 星 IRC+10216 的多频段谱线巡测研究

度娟[1]，李小虎[1, 2, 3*]

[1] 中国科学院新疆天文台，新疆乌鲁木齐市新市区科学一街 150 号，830011
[2] 新疆射电天体物理重点实验室，新疆乌鲁木齐市新市区科学一街 150 号，830011
[3] 射电天文与技术全国重点实验室，北京市朝阳区大屯路甲 20 号，100101
*Email: xiaohu.li@xao.ac.cn

富碳 AGB 星 IRC+10216 是研究演化晚期恒星的标准源，天文学家在其星周包层中已探测到 109 种分子品种（不含同位素）[1–4]，因此这颗 AGB 星是星际空间中名副其实的“分子工厂”。尽管研究者已基于各类射电望远镜发表了该天体多频段的谱线巡测研究结果，但在 90–116 GHz 与 480–560 GHz 仍缺乏系统的谱线巡测研究[5]。本研究利用紫金山天文台 13.7 米毫米波射电望远镜及赫歇尔空间望远镜（Herschel/HIFI），分别在 84.5–115.8 GHz（图 1 a）及 480–560 GHz（图 1 b）频段对 IRC+10216 开展了谱线巡测研究，计算了证认分子的激发温度、柱密度和相对于 H_2 的丰度，并估算了[^{12}C]/[^{13}C]、[^{32}S]/[^{34}S]、[^{28}Si]/[^{29}Si]及[^{12}C^{34}S]/[^{13}C^{32}S]的同位素丰度比。本研究在图 1 a 中共证认出 75 条分子谱线（96 个跃迁），源自 19 种分子品种及其同位素；图 1 b 中则证认出 109 条发射谱线和 9 条未知谱线，其中已证认谱线对应 10 种分子品种及其同位素。

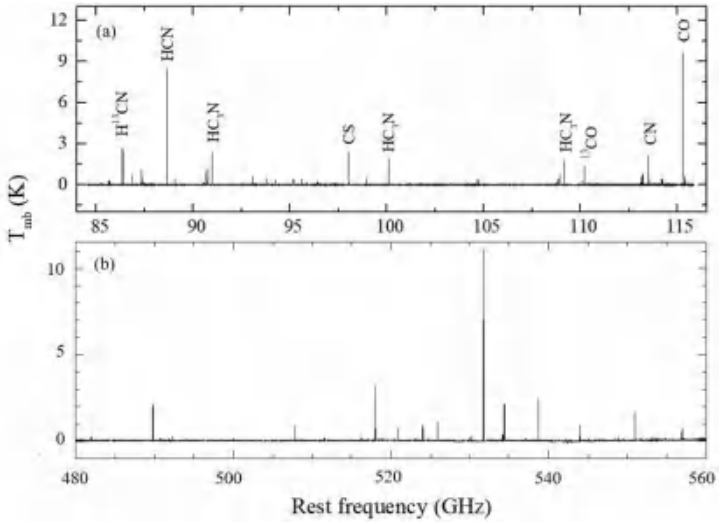


图 1：基于紫金山天文台 13.7 米毫米波射电望远镜（84.5–115.8 GHz，图 1 a）及 Herschel/HIFI 空间望远镜（480–560 GHz，图 1 b）对 IRC+10216 的谱线巡测结果。

关键词：天体化学；AGB星；IRC+10216；分子谱线

参考文献：

[1] Tuo, J., Li, X., Sun, J., et al. 2024, ApJS, 271, 45.

[2] Gupta, H., Changala, P.B., Cernicharo, J. et al. 2024, ApJ, 966, L28.

[3] Cernicharo, J., Pardo, J. R., Agúndez, M., et al. 2025, A&A, 700, L20.

[4] Pardo, J. R., Fonfría, J.P., Agúndez, M. et. al. 2025, A&A, 700, L6.

[5] Gong, Y., Henkel, C., Spezzano, S., et al. 2015, A&A, 574, A56.

行星大气光化学模拟实验装置及应用

赖悦苗[1]，曾毅[1]，郭庆[1,*]，袁开军[2,*]，杨学明[1]

[1]南方科技大学，广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055
[2]中国科学院大连化学物理研究所，辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号，116023
*Email: laiym@sustech.edu.cn

摘要正文：

地球从早期的无氧还原性大气演变为现今的富氧宜居环境，其大氧化机制是理解行星演化和地外生命探测的关键[1]。非生物产氧途径中，二氧化硫（SO_2）等分子在紫外光照下的光化学过程，被认为是早期地球氧气（O_2）的可能来源之一[2]。然而，该过程在近真实行星大气条件下的反应路径与产氧效率，尚缺乏定量的实验数据支撑。为此，我们成功设计并搭建了一套“行星大气光化学模拟实验装置”。该装置主要由三个核心部分构成：（1）大气模拟区，用于精确控制气体成分与压力，模拟从早期地球到各类地外行星的大气环境；（2）样品传输区，通过多级差分抽气系统，实现反应产物从高压反应腔到高真空检测区的有效传输；（3）产物检测与分析区，采用垂直引入式飞行时间质谱，实现对光化学反应中瞬态、低浓度产物的实时、高灵敏度检测。实验表明，该装置在特定实验条件下，其质量分辨率超过 3500，能够清晰区分硫（S）原子与氧气（O_2）分子，保障了检测数据的准确性。本装置可通过模拟各类行星的大气成分，研究如 SO_2 等关键分子在近真实条件下的光化学反应路径与产氧效率，从而为揭示地球早期氧气起源机制以及评估地外行星的潜在宜居性提供关键实验证据。

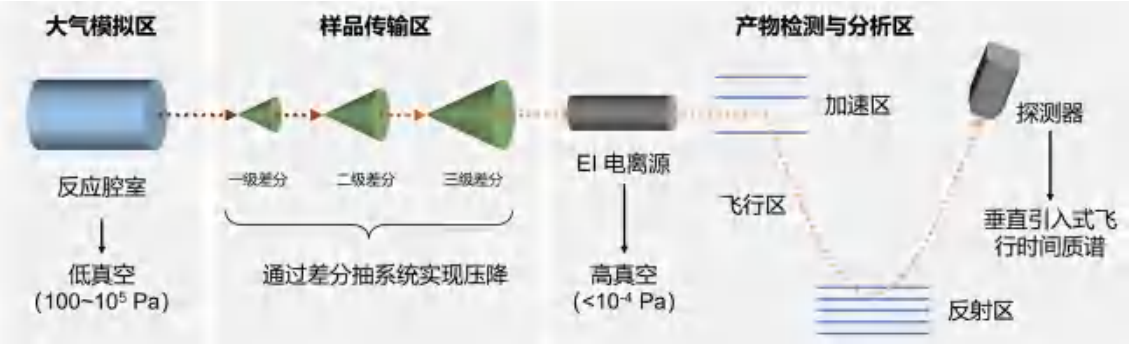


图1：实验装置原理图

关键词：大氧化事件；光化学模拟；差分抽系统；飞行时间质谱

参考文献：

[1] Lyons, T. W.; Reinhard, C. T.; Planavsky, N. J. Nature 2014, 506: 307.

[2] Chang, Y.; Fu, Y.; Chen, Z.; Luo, Z., et al., Chem. Sci. 2023, 14: 8255.