大连化物所等发现较低能量下化学反应中的量子几何相位效应

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/10460.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员孙志刚、中科院院士杨学明，与中国科技大学教授王兴安合作，在H+HD→H_2+D反应中的几何相位效应研究中取得新进展。

几何相位效应是一种量子力学现象，是系统的哈密顿绝热沿着闭合的参数回路周期性变化时，在波函数上引入的附加相位。多年来，该现象在凝聚态物理研究领域被广泛关注，其与量子霍尔效应以及拓扑绝缘体的研究均有密切关系。

在分子体系中，几何相位效应在势能面间的锥形交叉区域附近产生。以往研究中，研究人员对几何相位效应对于分子光谱的影响已有较充分的认识。但在反应动力学领域，由于化学反应的复杂性，研究人员对几何相位效应对于化学反应的影响未有确切认识。

得益于交叉分子束实验技术和理论计算方法的发展，大连化物所分子反应动力学研究团队和王兴安团队合作，在2018年观测到能量为2.77
电子伏时H+HD→H_2
+D反应中的几何相位效应，相关研究成果发表
在*Science*
上。研究中，其反应能量高于锥形交叉点（锥形交叉产生于2.5电子伏能量左右），因而几何相位效应相对比较明显，在实验和理论上易于研究。

此次研究工作侧重于反应能量低于锥形交叉点的几何相位效应的研究。能量越低，几何相位效应越微弱，因而研究难度更大。研究团队通过进一步发展离子成像交叉分子束技术和基于超球坐标的反应动力学理论，在2.28电
子伏反应能量的地方，观测到H+HD→H_2
+D反应中的几何相位效应。研究发现，与之前2.77电子伏反应能量处的几何相位效应不同，在较低能量处，几何相位效应不仅体现在前向散射振荡上，而且较多地体现在后向散射振荡上。科研团队采用经典轨线理论分析，揭示了几何相位效应来自于直接反应途径和漫游反应途径的干涉效应。该研究证实了在采用波恩奥本海默近似之后，化学反应中的几何相位效应是真实存在的。几何相位效应对于化学反应的影响，是以影响微分截面的角分布样式而体现的。

相关研究成果发表在《自然·通讯》（*Nat.
Comm.*
）上。研究工作得到国家自然科学基金委杰出青年基金、中科院战略性先导科技专项（B类）“

能源化学转化的本质与调控”的资助。

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发