

---

# 大连化物所超冷四原子反应的动力学计算研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11250.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

近日，中国科学院院士、中科院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室研究员张东辉团队，在超冷四原子反应的动力学计算研究中取得进展，实现超冷四原子反应的精确截面计算。

近年来，超冷 ( $T < 10^{-3}$  K) 分子的制备成为实验热点。在接近绝对零度的温度下，分子的德布罗意波长大于相互作用的尺寸，量子效应得到增强，研究超冷分子对验证量子力学基本理论有重要意义。此外，超冷分子间的碰撞通常只涉及最低的相对轨道角动量分波，通过对超冷分子状态的精细调控，可以在高精度水平上探索化学反应的动力学和机理。自2010年美国科学院院士黛博拉·金 (Deborah Jin) 与叶军 (Jun Ye) 的联合实验小组观测到超冷的铷钾基态分子之间的化学反应 ( $^{40}\text{K}^{87}\text{Rb} + ^{40}\text{K}^{87}\text{Rb} \rightarrow \text{K}_2\text{Rb}_2^* + \text{K}_2 + \text{Rb}$ ) 以来，碱金属超冷分子-分子碰撞和化学反应的实验和理论研究取得重要进展。然而，由于通用的非含时量子动力学紧耦合 (close coupling) 方法的计算量随基函数的数目  $N$  呈  $N^3$  增长，使得对超冷四原子反应的严格理论研究较为困难。

研究团队在前期工作中 ([Phys. Rev. Lett.](#) 2018, 120, 14340

1)，改进

原有的含时波包方法

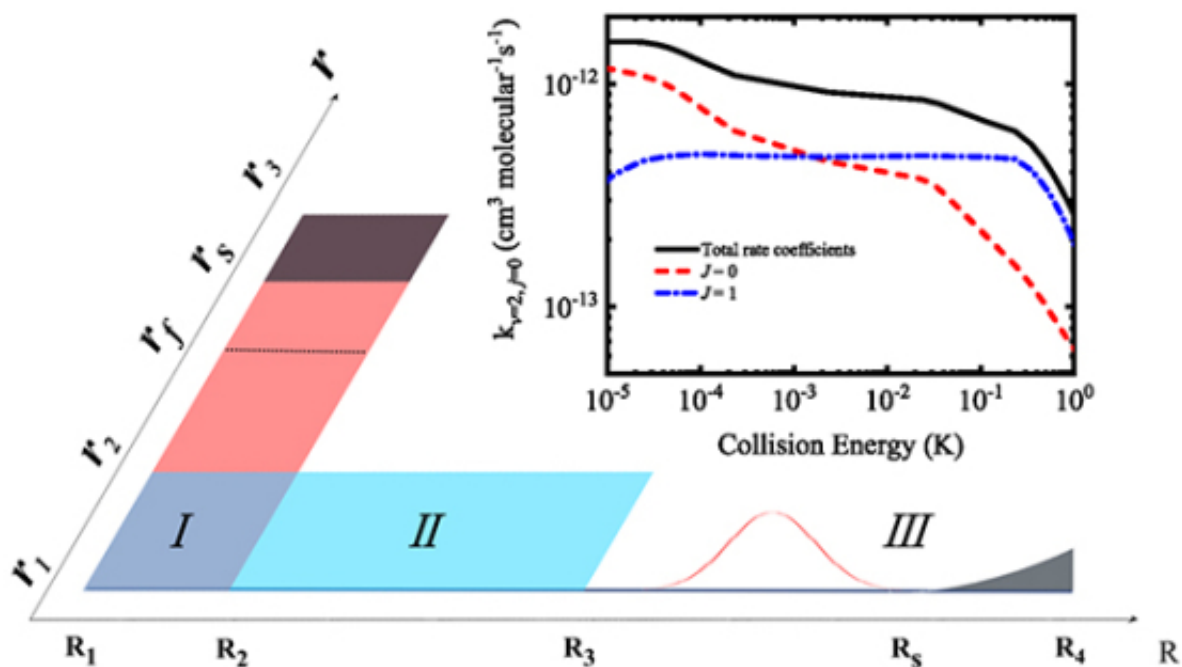
并将其应用于超冷反应性散射的计算中，

对三原子  $\text{F} + \text{H}_2$  反应的计算结果证明，含时波包法可在 Bethe-Wigner 阈值区域以上的碰撞能范围内准确描述超冷反应性散射过程。近日，借助含时波包法在数值效率上的优势，研究人员把含时波包动力学计算扩展到超冷四原子反应散射，并给出  $\text{OH} + \text{H}_2 (v=2, j=0) \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$  反应 Bethe-Wigner 阈值区域以上的精确积分截面和速率常数。计算结果说明含时波包计算可以在任意碰撞能下描述这一基准反应，且含时波包方法是研究超冷四原子反应的有力工具，未来可用于更多实验相关的超冷四原子反应研究中。

相关研究成果发表在《物理化学快报》 ([The Journal of Physical Chemistry Letters](#)

) 上。研究工作得到国家自然科学基金和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”的支持。



大连化物所超冷四原子反应的动力学计算研究获进展

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](http://www.iikx.com)转发