
科学家发现电子角动量对化学反应的影响

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12849.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！

科学家发现电子角动量对化学反应的影响。



插画灵感来自论文中实验数据和理论计算的和谐统一。其中太阳对应化学反应产物的微分截面，白色海鸥组成的图形对应实验数据中的处在微分截面前向的马蹄铁形结构，而山峦对应模拟计算的反应势能曲面。插画作者：陈磊、梁琰

化学反应动力学是在原子、分子层次上，深入研究化学反应如何进行，以求得最终实现影响进而控制化学反应速率和选择反应通道。现今科学技术的发展日新月异，分子反应动力学的研究手段也在不断提高。

目前，交叉分子束实验仪器是从微观层次上研究化学反应动力学的唯一实验装置。同时，想要获得化学反应动力学微观过程的具体机制，基于量子力学原理的分子动力学数值模拟计算也必不可少。

近日，中国科学院大连化学物理研究所杨学明院士、孙志刚研究员与中国科学技术大学王兴安教授的合作研究取得新进展。研究团队利用高分辨率的交叉分子束离子成像装置，研究了氟原子（F）+氢氘（HD）分子反应的微观动力学过程，发现可以利用该反应中特殊的分波共振现象，揭示F原子的电子角动量对该反应散射动力学过程的影响。相关研究结果2月26日发表于《科学》。

据了解，在单次碰撞而发生化学反应的条件下，交叉分子束装置可以探测到具有振转态分辨的化学反应产物。在构建高精度势能面的基础上，开展精确的量子分子反应动力学理论分析，则可以详细推断出具有量子态分辨的化学反应微观动态过程。

孙志刚表示，实验装置的分辨率和理论计算的动力学过程分析能力，体现了科研人员获得化学反应动力学过程细节的水平，也体现了当今科技发展的水平。

经过半个多世纪的发展，交叉分子束实验装置的分辨率获得了很大的提升。1986年诺贝尔化学奖的获得者李远哲教授发展出典型的通用型交叉分子束实验装置。该装置具有产物振动态的分辨率，实现了首次对F+氢气（H₂）及其同位素反应的详细研究。上世纪90年代所发展的交叉分子束离子成像装置，在具有产物振动态分辨率的条件下，将研究对象从三原子分子体系扩展到多原子分子反应体系。而几乎同时发展的氢原子里德堡态标识的时间飞渡谱技术，将交叉分子束装置的分辨率提高到产物的转动态。利用这样高分辨率的实验装置，和精确的量子动力学理论研究相结合，F+H₂及其同位素反应中的反应共振态的图像，得到了清晰的解释。

人类对于大自然奥秘探索的追求，是永无止境的。

近年来，杨学明和王兴安进一步发展了交叉分子束离子成像装置，使探测产物的分辨率提高到产物的转动态。利用该实验装置，结合新发展的量子动力学理论分析方法，首次确定了化学反应中量子几何相位效应的存在，相关研究结果2018年报道在《科学》上。

至此，化学反应动力学的研究，经历了从产物量子振动态分辨率到转动态分辨率的发展。

而后，孙志刚和王兴安更希望在更微观层次上研究化学反应动力学过程，比如，探究电子角动量甚至原子核自旋角动量如何影响化学反应动力学过程，他们认为这将是化学反应动力学研究的又一个标志性的进展。

F+HD反应是一个非常特殊的反应，其具有明显的分波共振效应。研究人员猜想，针对该反应开展高分辨率的反应动力学研究，或将发现电子角动量对化学反应的影响。

为此，研究团队利用该交叉分子束装置，结合孙志刚所发展的考虑电子角动量效应的量子动力学理论模拟方法，详细研究了具有分波共振的F+HD反应的动力学过程。研究发现，可以利用特殊的分波共振现象，来揭示F原子的电子角动量对反应过程的影响。其表现是，考虑F原子的电子角动量效应之后，单一的分波共振可以变成具有四重精细结构的分波共振，其可以改变化学反应产物的角度分布。这一改变只能通过高分辨率的交叉分子束成像装置才能够观测到。

电子转动角动量的能量，相对于分子振动的能量，抑或分子转动的能量，是十分微小的。首次探测到电子角动量对于化学反应动力学过程的影响，是分子反应动力学领域研究的一个突破，进一步提升了人类对自然界的认识能力。（来源：中国科学报卜叶 桂运安）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/science.abf4205>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：杨学明等 来源：《科学》

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](https://www.iikx.com)转发