

---

# 研究揭示超冷反应中“几何相位”效应的物理本质

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13008.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！*

研究揭示超冷反应中“几何相位”效应的物理本质。近日，中科院大连化物所分子反应动力学国家重点实验室张东辉院士团队在超冷反应研究中取得新进展，揭示了超冷O+OH反应中显著几何相位效应的物理本质。相关研究成果发表在《物理化学快报》上。

在接近绝对零度的温度下，分子的德布罗意波长远大于分子间相互作用的尺寸，并且分子的碰撞只能通过一个或少数几个分波进行，因此，化学反应的量子特性可以得到充分的体现。此前基于求解非含时薛定谔方程的量子动力学计算表明，O+OH反应中的几何相位效应在超低温下明显增强，对特定的产物态考虑几何相位前后的预测反应速率能够相差多达两个数量级。该发现在超冷控制化学中具有重要的潜在应用价值，因此引起了广泛关注。但非含时量子动力学计算通常只能获得反应的速率常数信息，因此该反应中几何相位效应的具体作用机理依然有待探索。

在此前工作中，该团队通过进一步发展的含时波包方法，首次实现了对超冷反应散射的含时计算。该方法能够直接提供反应的散射波函数，从而为超冷化学反应过程提供动力学信息。去年，该团队还发展出一种高效的新方法，即在含时波包法框架下研究几何相位问题。近日，该团队结合这两种方法首次将几何相位引入了超冷含时波包动力学计算，得到了超冷O+OH反应的散射波函数，对波函数的分析揭示了绕行锥形交叉两侧的反应通道之间的量子干涉效应和随之而来的几何相位效应的物理本质。

该工作验证了此前关于超冷反应几何相位效应来源的理论假设，揭示了光学晶格阱或初始态定向等量子控制技术有可能控制超冷反应的反应性。（来源：中国科学报卜叶 黄嘉宇）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c00133>

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](mailto:shouquan@stimes.cn)。

作者：张东辉等 来源：《物理化学快报》

---

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