大连化物所揭示超冷反应中“几何相位”效应的物理本质

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/13043.html

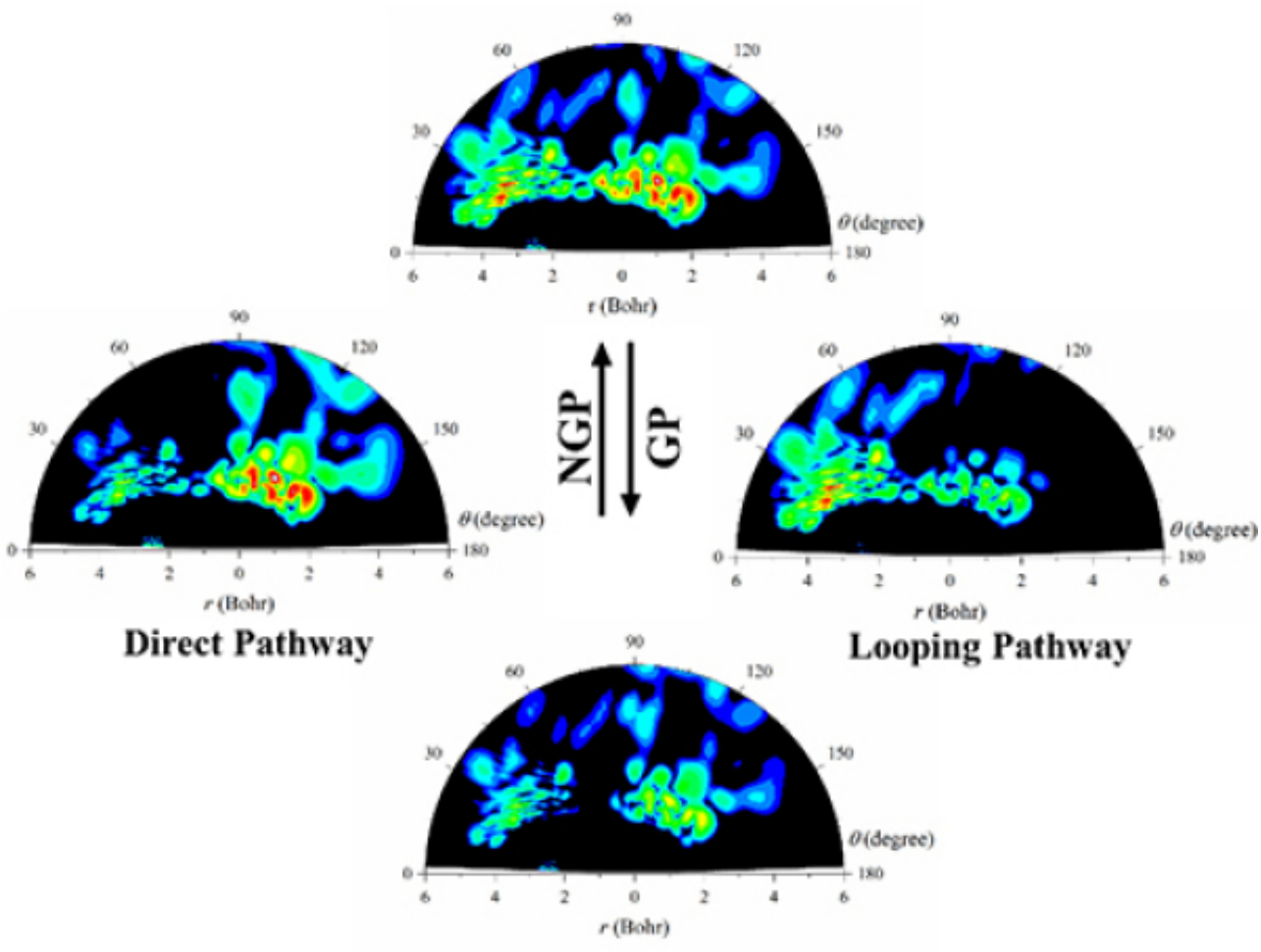
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

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。

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，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得到充分体现。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。该研究在超冷控制化学中具有重要的潜在应用价值而引起广泛关注。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，因而该反应中“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（*Phys. Rev. Lett.*，2018），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。2020年，该团队发展了一种高效的新方法，在含时波包法框架下研究几何相位问题（*J. Chem. Phys.*，2020）。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。该研究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。

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、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”等的资助。



大连化物所揭示超冷反应中“几何相位”效应的物理本质

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