
强场驱动分子解离中的拉比振荡

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/22402.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！

强场驱动分子解离中的拉比振荡。拉比振荡是量子世界中最基本的物理过程之一，它描述的是一个二能级量子系统在周期性外场驱动下，基态和激发态的布居数会以特定频率周期性振荡的物理现象。拉比振荡在光与物质相互作用的各个领域中都广泛存在，对帮助人们理解和控制微观量子系统的含时演化过程具有重要意义。

相比于原子，分子有着额外的振动自由度，为拉比振荡的调控增加了一个新的维度。以最简单的氢分子离子为例，在其化学键拉伸过程中，基态和激发态之间的能级差和跃迁偶极矩随着核间距不断改变，导致在激光场中其拉比振荡的频率也会不断发生变化。尽管在原子与固体系统中拉比振荡已经被广泛认识，关于分子中拉比振荡的强场理论与实验研究却依然很匮乏。一般而言，分子中电子的拉比振荡行为不可避免地会与核的运动耦合在一起，这种复杂的耦合过程对分子化学键断裂的影响仍然是一个悬而未决的问题。

近日，上海交通大学何峰教授和华东师范大学吴健教授的联合研究团队深入研究了分子强场拉比振荡行为，发现分子化学键断裂产生的离子碎片的动能谱具有复杂的结构特征，远远超出了传统Floquet理论和单光子解离图像的预言，揭示了与核运动耦合的拉比振荡对理解分子化学键断裂动力学的重要性。

图1 分子解离动力学中的拉比振荡示意图。

在本文中，研究者们通过数值模拟与实验相结合的方法，研究了在400 nm强激光作用下的氢分子离子化学键断裂解离动力学。在解离过程中，氢分子离子与激光场耦合，使电子可以在 $1s\sigma_g$ 和 $2p\sigma_u$ 态之间来回跃迁，形成拉比振荡过程。结合分子化学键拉伸过程，如图1所示，核波包可能会沿着两条势能曲线不断交替向更大核间距方向运动，即为rolling过程；也可能在 $2p\sigma_u$ 态向外运动一段距离后跃迁回到 $1s\sigma_g$ 态向内运动，然后再跃迁到 $2p\sigma_u$ 态上发生解离，即为looping过程。这两种不同的解离路径会导致解离核能谱呈现随光强变化的复杂结构，如图2所示。随后研究者们通过含时分析以及与分析结果进行对比，进一步验证了rolling和looping这两种解离动力学的存在。当激光较强时，传统理解的单光子解离可能是分子经历半整数次拉比振荡而解离的特殊情况。此外研究者们还将理论与实验相结合，证明实验上观察到解离核能谱随光强的变化，正是由于分子中的拉比振荡导致的。

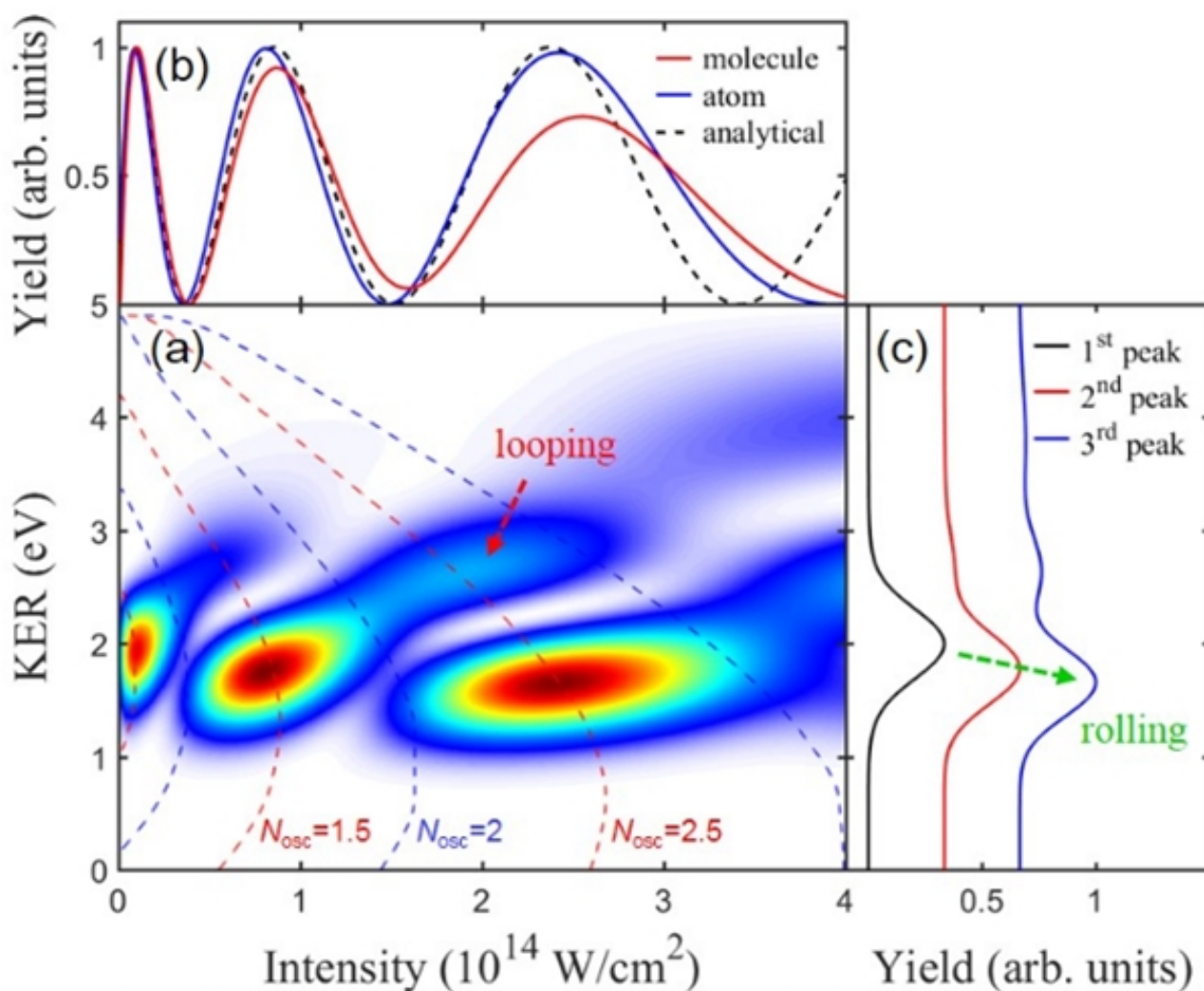


图2 分子拉比振荡的数值模拟结果。a改变光强的解离核能谱。b不同情况下改变光强的布居数。c不同光强时的解离核能谱。

本文所研究的分子核间距依赖的动态拉比耦合过程作为拉比振荡这一基本物理现象从原子拓展到分子体系的重要桥梁，使我们更深刻理解激光诱导的分子化学键断裂过程。同时文中提出基于拉比振荡的电子跃迁机制也为认识分子超快过程提供了一个新颖的含时图像，并有望应用于更多复杂分子体系与强激光相互作用的动力学研究。

该成果以 Rabi oscillations in a stretching molecule 为题发表在Light: Science

Applications。(来源：LightScienceApplications微信公众号)

相关论文信息：<https://www.nature.com/articles/s41377-023-011075-9>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性;如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任;作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

作者：何峰等 来源：《光：科学与应用》

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