研究揭示化学反应中“几何相位”效应

作者：刘万生 王永进 来源：中国科学报

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/3333.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！

研究揭示化学反应中“几何相位”效应。中国科学技术大学教授王兴安，中科院大连化物所研究员孙志刚、张东辉、杨学明等人，利用自主发展的具有国际上最高分辨率的交叉分子束离子成像装置，结合高精度量子分子反应动力学理论分析，对H+HD反应中的几何相位效应展开深入研究并取得重大突破。相关成果12月14日在线发表于《科学》杂志。

王兴安和杨学明等人自主研制了一台独特的结合阈值激光电离技术以及离子速度成像技术的交叉分子束反应动力学研究装置，使得实验上获得的氢原子产物的散射角度分辨率达到同类仪器的最高水平。

利用这一装置，研究小组成功测得H+HD→H2+D反应的全量子态分辨产物速度影像，并在实验上观测到转动态分辨的H2产物前向角分布快速振荡结构。在理论计算上，孙志刚等人发展了独特的描述化学反应中几何效应的动力学理论，并基于张东辉等人发展的高精度势能面，通过精确量子动力学分析发现，只有引入几何相位效应的理论计算，才能正确描述实验观测到的前向散射振荡结构。

半个多世纪以前，科学家发现在波恩—奥本海默近似或绝热近似下，必须引入几何相位才能准确描述这些体系的量子动力学行为。而引入几何相位对于量子体系的动力学干涉行为产生改变，这就是众所周知的几何相位效应。

此次研究人员揭示了几何相位在化学反应中独特的作用以及几何相位效应的物理本质，对于研究广泛存在锥型交叉的量子体系具有重要意义。同时，他们还在实验上发现和证实了这一重要反应体系在高能反应时的一种全新反应机理，对于从根本上理解这一重要体系的高能反应动力学具有重要意义。(来源：中国科学报 刘万生 王永进)

相关论文信息：DOI：10.1126/science.aav1356

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