科学家首次在实验上观测到超低温度下基态分子与原子之间的散射共振

作者：writer 来源：中国科学技术大学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/3741.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！



科学家首次在实验上观测到超低温度下基态分子与原子之间的散射共振。中国科学技术大学潘建伟、赵博等利用超冷原子分子量子模拟在化学物理研究中取得突破：他们通过对磁场的精确调控首次在实验上观测到超低温度下基态分子与原子之间的散射共振，向基于超冷原子分子的超冷量子化学研究迈进了重要一步。1月18日，这一研究成果发表在国际学术期刊《科学》上。 量子计算和量子模拟具有强大的并行计算和模拟能力，不仅为经典计算机无法解决的大规模计算难题提供有效解决方案，也可有效揭示复杂物理系统的规律，为新能源开发、新材料设计等提供指导。

量子计算研究的终极目标是构建通用型量子计算机，但这一目标需要制备大规模的量子纠缠并进行容错计算，实现这一目标仍然需要经过长期不懈的努力。当前，量子计算的短期目标是通过发

展专用型量子计算机，即专用量子模拟机，能够在某些特定的问题上解决现有经典计算机无法解决的问题。例如，超冷原子分子量子模拟，利用高度可控的超冷量子系统来模拟复杂的难于计算的物理系统，可以对复杂系统进行细致和全方位的研究，从而在化学反应和新型材料设计中具有广泛的应用前景。 在量子模拟研究方向上，人们首先研究的是理论上可以处理的问题，通过理论和实验比较来演示量子模拟的可靠性和潜在的优越。例如，2016年潘建伟、陈帅等在《科学》杂志发表研究论文，首次在超冷原子量子模拟中实现了二维自旋轨道耦合的玻色-爱因斯坦凝聚，发展了超冷原子人造规范场模拟凝聚态拓扑问题的新途径;2017年，潘建伟、陆朝阳等在《自然-光子学》首次报道了针对玻色取样任务的光量子计算原型机，超越了早期的电子管和晶体管计算机，但仍需要技术上的进一步发展才可能超越目前的经典超级计算机。此外，最近IBM、Google等国际知名科技公司利用超导量子系统模拟了小分子体系的基态能量，结果误差满足化学精度，相关论文发表在《自然》杂志等学术期刊上。然而，对于这一类简化小分子，目前水平的演示性量子实验无论在速度和精度方面都仍然无法超过经典计算机。 量子模拟最有前途的现实应用是真正解决那些经典数值计算方法无法有效求解的重要多体问题。当前，这些问题的解决是专用量子计算机的重要发展目标。例如，在化学物理领域，通过量子力学计算原子分子相互作用势能面以及模拟粒子在这一势能面下分子碰撞的动力学，就是这样一类重要科学问题。理论上计算原子分子的势能面需要求解多电子体系的薛定谔方程来得到电子系统的基态能量。由于电子之间存在强关联，其基态能量无法精确求解。因此理论量子化学发展各种方法来近似求解势能面，并在小质量少电子的分子体系取得成功。但是对大质量多电子的分子体系，理论计算的势能面已经无法可靠地模拟分子碰撞中的动力学行为。 通过构建针对特定问题的专用量子模拟系统，势能面的信息可以由实验测量原子分子的散射共振来获得。散射共振的测量结合理论建模可以准确地反推出势能面的全局信息，从而给出势能面最精准的刻画。分子的散射共振是典型的量子现象，只有在超低温度下才会显现出来。近年来，随着超冷原子分子技术的发展，完全可控的超冷基态分子可以从接近绝对零度的原子气中被制备出来。自2008年美国科学院院士黛博拉·金(Deborah Jin)和叶军(Jun Ye)的联合实验小组制备了铷钾超冷分子以来，多种碱金属原子的双原子分子先后在其他实验室中被制备出来。但由于这种大质量多电子分子体系的散射共振无法在理论上进行预测，十多年来观测超冷分子的散射共振一直是该研究领域在实验上的重大挑战。 在该项研究中，中国科大研究团队首次成功观测到了超低温下钠钾基态分子和钾原子间的散射共振。在实验中，他们从温度为几百纳开的超冷钠和钾原子混合气出发，制备出处于不同超精细态的钠钾振转基态分子，并将之与处于不同内态的钾原子相混合。在此基础上，通过精密的调节磁场来精确地调控原子分子散射态和三体束缚态的能量差，成功地在分子损失谱上观测到了超低温下钠钾基态分子和钾原子间的一系列散射共振峰。这些散射共振提供了对含有高达49个电子的钾-钠-钾三原子分子复杂体系势能面的超高精度测量，成功获取了势能面在短程部分的重要信息。

该工作得到《科学》审稿人的高度评价：这是一个非常重要的和令人振奋的工作，虽然超冷分子已经被制备出来，却从没有分子散射共振被报道过、当前超冷化学研究的主要困难在于势能面的短程部分的信息无法从以往的实验中获取。从这种意义上说，这一工作改变了超冷极性分子和超冷物理化学的游戏规则;这一工作是当前原子分子物理研究的亮点，具有非常重要的意义。
该研究工作得到中科院、科技部、自然科学基金委和安徽省的支持。 相关论文信息：DOI: 10.1126/science.aau5322 中国科大利用超冷原子分子量子模拟在化学物理研究中取得突破

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