

---

# 研究揭示分子光解离通过单一锥形交叉反应通道的量子干涉现象

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38874.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！*

研究揭示分子光解离通过单一锥形交叉反应通道的量子干涉现象。

量子干涉是量子力学的核心

原理，是微观粒子波动性的重要体现。21

世纪初，研究人员首次在水分子的121.6nm

光解离实验中观测到来自两个不同锥形交叉区解离通道的量子干涉，此后，量子干涉现象在化学反应中被陆续揭示。迄今为止，这些干涉现象大多源于两条空间上可区分的反应路径，类似双缝干涉。相比之下，光学中另一类基本干涉现象——单缝衍射，由于源于同一反应通道内不同路径的相干叠加，长期缺乏实验的直接证据。

近日，中国科学院大连化学物理研究所等研究团队在分子光化学领域取得进展，观测到水分子光解离通过单一锥形交叉反应通道时形成的量子干涉现象。

团队利用极紫外光源制备水分子同位素（HOD

）到高激发态，结合高分

辨探测技术测量产物的量子态分布，发现OD

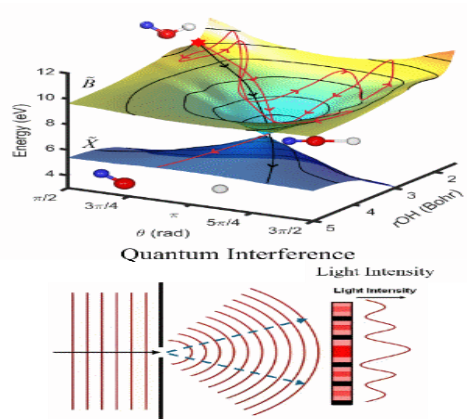
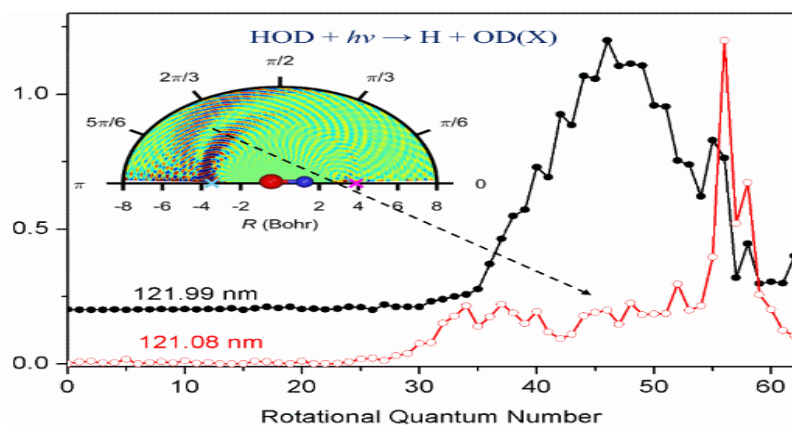
产物振转量子态分布随激发波长变化。基于神经网络，团队构建了水分子高精度多电子态耦合势能面，并结合全维量子动力学计算，阐明该现象来源于水分子在单一锥形交叉通道解离时直接和间接路径的量子干涉。直接路径通过交叉点后在基态快速解离，间接路径则在交叉点的上锥区被短暂捕获后，再转移至基态解离。这两类反应路径在空间上不可区分，但经历的时间不同，其物理本质与光学中的单缝衍射相似。

该研究结合高分辨实验和高精度理论计算，展示了分子光解离通过单一反应通道的量子干涉现象，深化了学界对势能面锥形交叉相关的非绝热化学反应过程的本质认识。研究成果为量子调控非绝热动力学提供了新的思路和实验依据，也为理解复杂分子体系的光化学行为提供了关键理论支撑。

相关研究成果发表在《自然-化学》（Nature

Chemistry）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、科学技术部、中国科学院等的支持。

[论文链接](#)



大连化物所揭示分子光解离通过单一锥形交叉反应通道的量子干涉现象

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](http://www.iikx.com)转发