大连化物所等发表关于趋近绝对零度的量子共振的评述文章

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/9483.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！

5月8日，中国科学院院士、中国科学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杨学明和南方科技大学博士杨天罡应邀在《科学》（*Science*）发表评述文章，讨论趋近绝对零度的原子与分子碰撞过程中量子散射共振研究的进展。

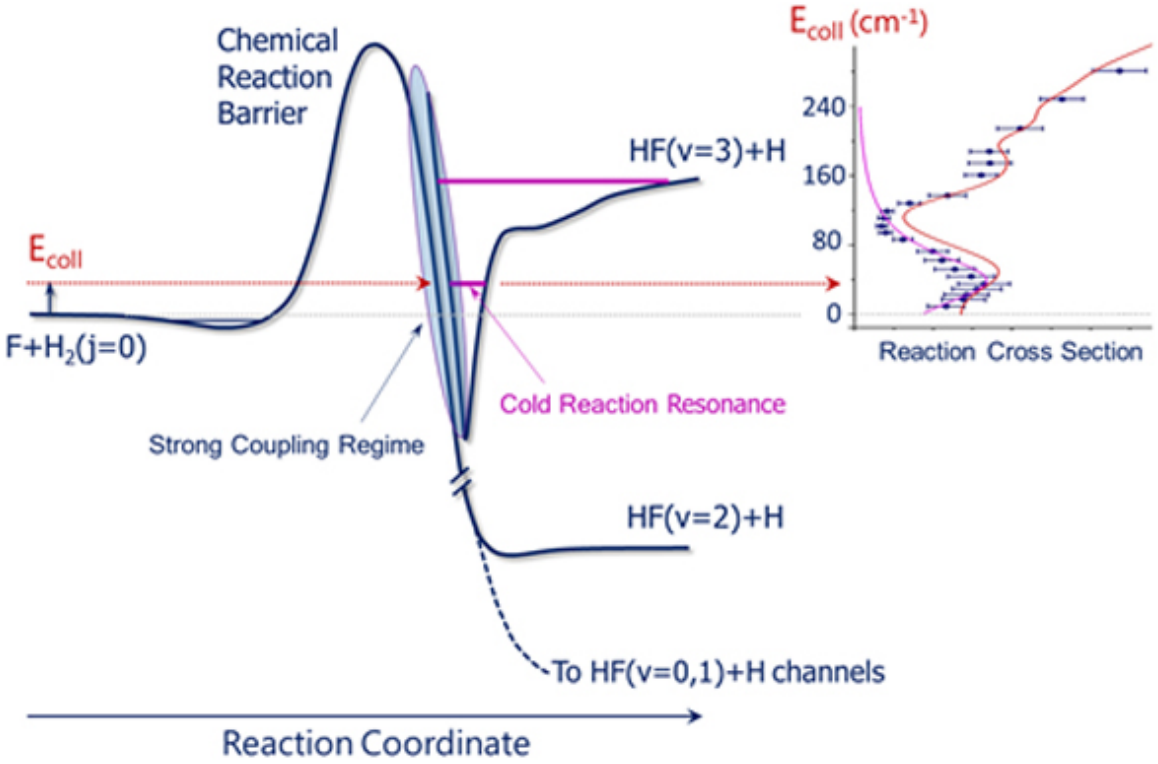
众所周知，原子与分子的碰撞传能以及化学反应过程是受量子力学的规则控制的。理解量子效应在原子与分子碰撞中的作用是理解能量传递以及化学反应过程的根本。而量子效应在低温下能够更好地保存，因此低温条件下对碰撞结果的影响会更加显著。量子散射共振给实验提供了一种观测碰撞过程中量子效应的方法，但由于其“寿命”很短，实验观测的挑战很大。

该文章详细介绍了同期发表的荷兰科学家关于极低温量子散射共振的研究工作（Science, 6494, 626-630, 2020）。通过利用斯塔克减速技术产生的NO(j=1/2f)束源和冷He束源结合高分辨的速度成像技术，实现了碰撞能0.3至12.3 K下NO+He体系的高分辨非弹性散射动力学研究，并观测到了多个共振现象。此外，该实验结果只能用CCSDT(Q)下发展的最新的精确势能面上的计算来描述，也表明了在此非弹性散射系统中，实验观测到的量子散射共振图像可以精确地测试量子计算结果，帮助理解量子效应在原子分子碰撞能量传递中的作用。

该文章还介绍了大连化物所关于研究接近绝对零度下量子散射共振在化学反应中发挥重要作用的例子。$F+H_2 \rightarrow HF+H$反应是星际化学中产生HF分子的重要过程。但是$F+H_2$反应具有1.8 kcal/mol高度的势垒（629 cm^{-1}），经典模型下在接近绝对零度时这个反应几率是完全可以忽略的。杨学明团队通过对现有H原子里德堡态标示时间飞渡谱的交叉分子束装置进行了显著改进，观测到了反应温度低至14 K（9.8 cm^{-1}）时此反应仍然发生的证据，同时观测到了约40 cm^{-1}碰撞能的一个反应共振峰。进一步理论分析表明，$F+H_2$在低温时的反应性，是通过反应共振态所增强的隧穿效应而产生的，而不是通常简单的隧穿效应，这也是在接近绝对零度下此反应仍然可以发生的原因。如果将共振态所导致的共振增强效应移除，$F+H_2$（v=0，j=0）在10 K温度以下的反应速率常数，会降低三个数量级以上（Nat. Chem.，11，744-749，2019）。

该文章最后指出趋近绝对零度量子共振的研究进展得益于新的分子束方法以及新的探测技术的发

展，精确的理论和实验之间的互动推动这一领域的发展。量子散射共振研究有助于科研人员更加深刻理解气相碰撞中的传能以及反应过程，对于理解复杂体系如星际化学、大气以及燃烧等过程也具有重要意义。



$F+H_2 \rightarrow HF+H$反应过程中的超冷反应共振图像

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