

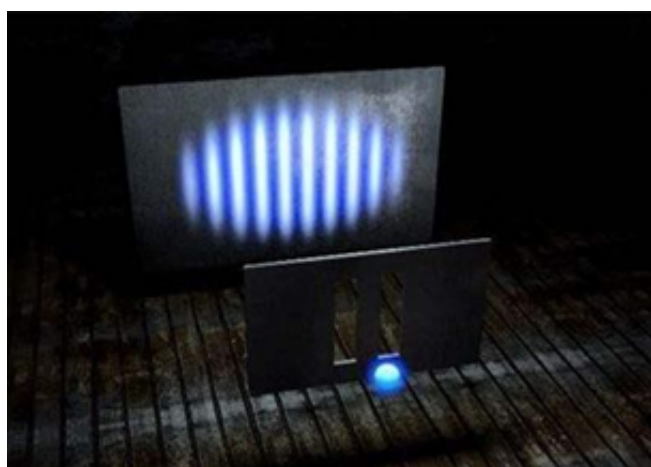
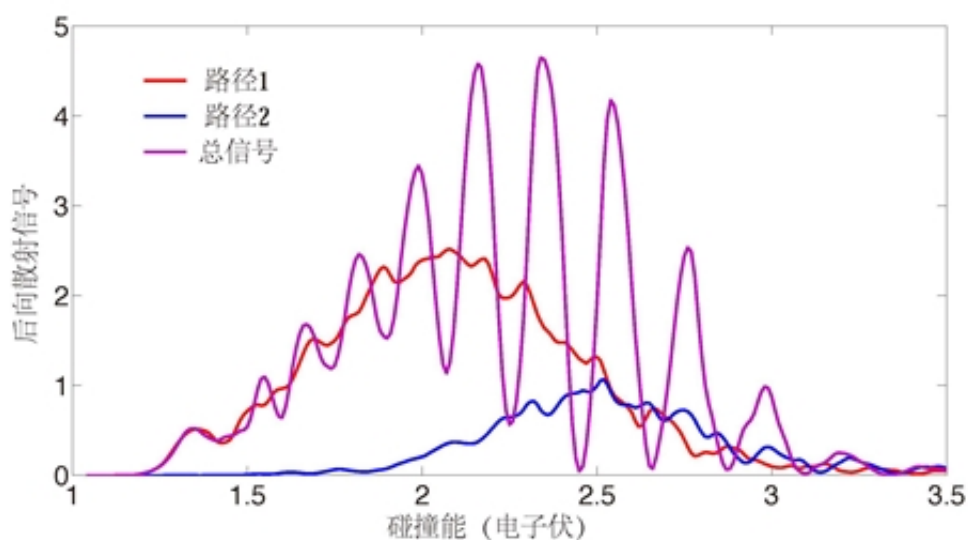
# 科学家发现最简单化学反应中奇特量子干涉现象

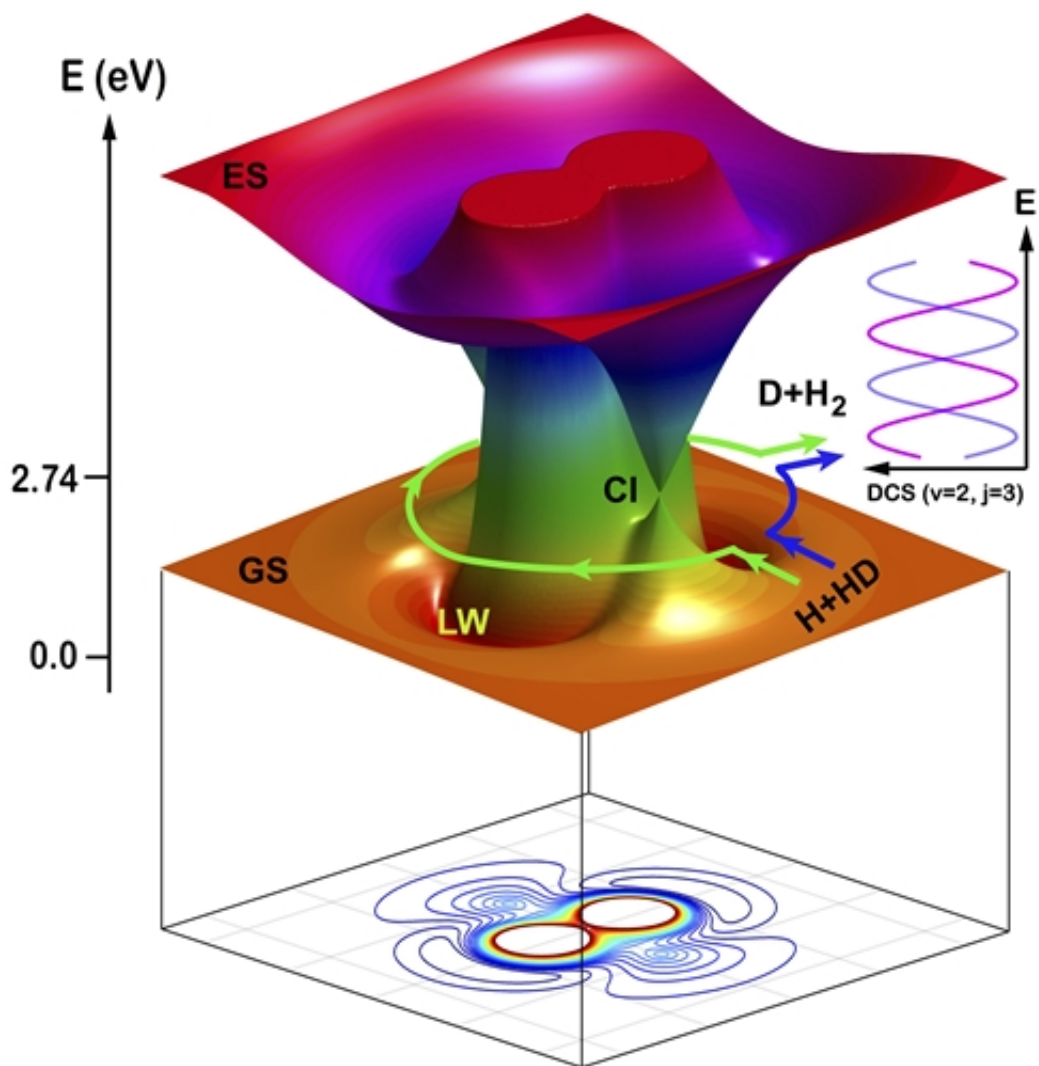
作者：writer 来源：爱科学

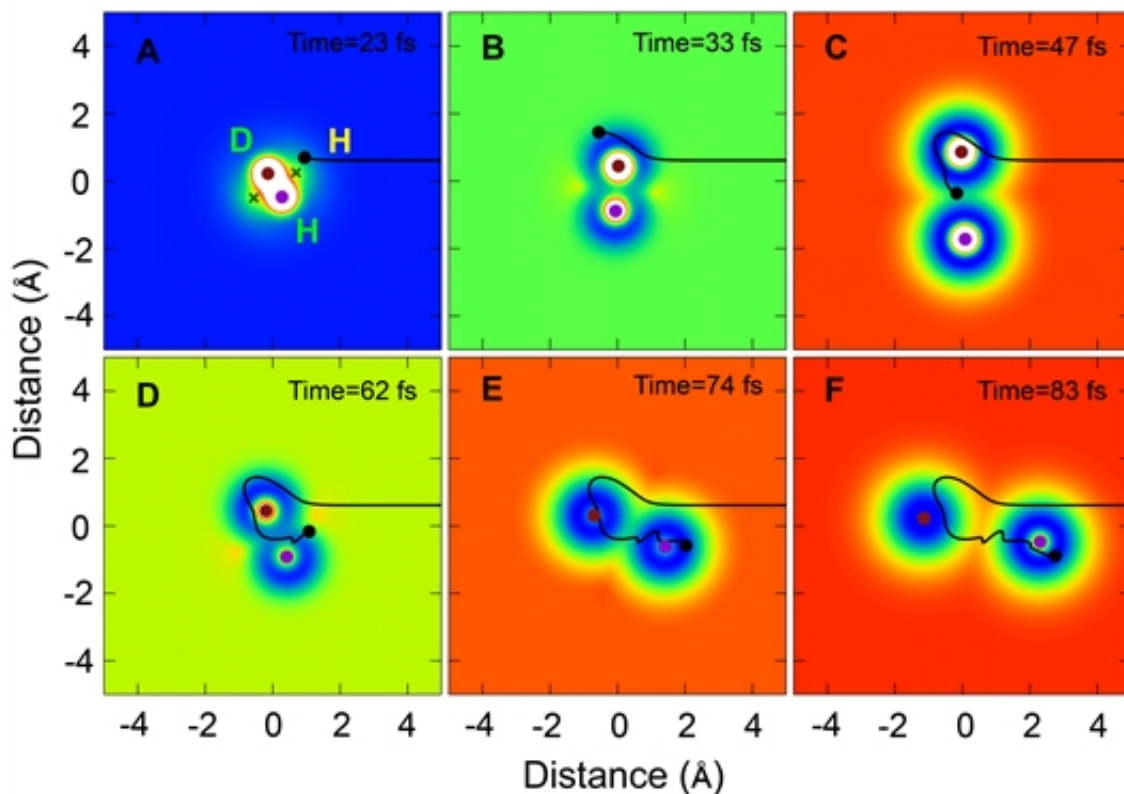
本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/9671.html>

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！

科学家发现最简单化学反应中奇特量子干涉现象。







随着微观粒子各种量子现象研究的不断开展，量子力学的大厦被逐渐搭建。同时，与之相关的化学反应动力学过程中的量子力学现象，经历几十年的研究更显具体。

5月15日，《科学》杂志在线发表相关研究成果。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杨学明和张东辉院士团队在对最简单的化学反应氢原子加氢分子的同位素 ( $H + HD \rightarrow H_2 + D$ ) 反应的研究中，发现了一种不常见的量子干涉效应，并且利用这一量子干涉效应首次揭示了化学反应中远低于锥形交叉点的几何相位效应。

该研究一方面再次揭示了化学反应的途径是复杂而有趣的。尽管这一自然界中最简单的反应体系已经被研究得相当透彻，但仍然存在着科学家们以前完全认识不到的新而且奇特的化学反应机理。同时，量子干涉效应的发现也揭示了原子分子因碰撞而发生化学反应过程的量子特性。杨学明告诉《中国科学报》。

这有助于更加深入地理解化学反应过程，丰富对化学反应的认识。论文作者之一，中科院大连化学物理研究所研究员孙志刚说。

---

## 因为 测量而精确

如果从钻木取火开始算起，人类利用化学反应已有极长历史。关于化学反应的知识，早已成为现代文明的重要基石。但令人类窘迫的是，迄今为止，人类对化学反应的理解仍然是粗浅的；在很多人眼中，化学仍然是一门半经验的科学。

情况正在变化。正如大连化物所分子反应动力学国家重点实验室新完成的这项工作，科学家们通过结合实验，正在努力发展准确模拟和预测化学反应的方法，使化学研究日益变得精确和细致。

杨学明这样描述此次的发现,这一实验的成功是谢雨润、王玉奉等几位同学努力的成果。要观测这一类的量子干涉效应非常困难。他们经过实验装置的改进以及不懈的实验研究才发现了这一有趣的量子干涉现象。更有意义的是通过这一量子干涉现象，在远低于这一反应的锥形交叉点的能量可以探测到几何相位效应，这对于研究几何相位效应在化学反应中的影响有重要的学术意义。

提及这次成果发现，论文作者之一，中科院大连化学物理研究所研究员肖春雷现在还能清晰回忆起团队在一起实验的日日夜夜。通过不断改进交叉分子束实验装置，他们极大提高了实验的分辨率，在量子态和散射角同时分辨的水平上对化学反应的产物进行测量，最终成功捕捉了反应中量子干涉现象的蛛丝马迹。

我们研究的目的是，理解化学反应到底怎么发生，从而发展出准确模拟和预测化学反应的方法。也许有一天，当人们提起化学，脑海里浮现的不再是试管烧杯；当人们想了解某个化学反应，他会拿起键盘，往计算机中输入分子式，而计算机告诉他具体的过程。肖春雷说。

他说，到那时，化学会让人类社会发生翻天覆地的变化。

## 化学反应的量子性

在日常生活中，我们常常能观察到波的干涉现象。例如在太阳光底下的肥皂泡，由于阳光在肥皂膜上下两个表面之间的干涉效应，而显现出斑斓的颜色。

---

物理学中，干涉是两列或两列以上的波在空间中重叠时发生叠加从而形成新的波形的现象。在著名的杨氏双狭缝干涉实验中，当一束光透过两个并排的狭缝后，在后面的挡板上会出现明暗相间的现象：最亮的地方光强超过了原来两束光的光强之和，而最暗的地方光强有可能为零，这种光强的重新分布被称作干涉条纹。

光子、电子、原子、分子等粒子，在其运动过程中，遵循量子力学原理，具有波粒二象性。因此，经过不同运动途径达到同一区域或量子态的粒子，会像光的传播一样发生干涉效应。

化学反应的发生，本质上是微观粒子的碰撞，并伴随化学键的断裂和生成。因此在化学反应中，量子现象是普遍存在的。但是，想要准确理解这些量子现象产生的根源非常困难，因为量子现象很容易被掩盖，而且实验上也难以精确分辨这些量子现象的特征。

解决复杂问题经常从简单模型入手。在自然界所有化学反应中，氢原子加氢分子（ $H+H_2$ ）及其同位素（ $H+HD$ ）的反应是最简单的。该体系只涉及三个电子，因此能够精确计算出这三个原子在不同构型时的相互作用力。孙志刚说，在此基础上，通过求解薛定谔方程，就能够实现分子反应动力学过程的计算机模拟，从而能够在微观层次上深入理解化学反应过程。

科学家们基于对这个简单的化学反应的动力学研究，积累了丰富的理论化学知识。但由于化学反应进程的复杂性，人们仍在不断的深入相关的研究，以便加深对于化学反应过程的认识。

### 捕捉反应中的蛛丝马迹

基于前期的研究，团队成员通过理论模拟发现，在特定散射角度上， $H+HD$ 反应生成的产物 $H_2$ （氢分子）的多少会随碰撞能而呈现特别有规律的振荡。类似的振荡现象，在不少反应的理论计算结果中出现过，但是那些振荡都没有像 $H+H_2$ 反应这么有规律。而且，迄今为止，对于这样的现象，科学家们并没有一个清晰的解释。

针对这个振荡现象，大连化物所开展了理论结合实验的详细研究。理论上，进一步发展了量子反应散射理论，创造性地发展了利用拓扑学原理来分析化学反应发生途径的方法。实验上，通过改进了的交叉分子束装置，实现了在较高碰撞能处对后向散射信号的精确测量。肖春雷说。

---

拓扑学分析表明，这些后向散射的振荡实际上是由两条反应途径的干涉造成的。这两条反应途径对于后向散射均有显著贡献，但它们各自的幅度随着碰撞能变化并无显著变化，呈现出一条比较光滑的曲线。而它们的相位随着碰撞能变化，一个呈线性增加，另外一个呈线性减小，因此，相互干涉的结果就呈现了强烈的有规律的振荡现象。

研究人员进一步采用经典轨线理论进行分析，结果表明，其中一条反应途径对应于我们所熟知的直接反应过程：H碰撞后直接拐走了HD中的H原子。而另外一条反应途径对应于一条称为漫游机理的反应过程：H与HD开始碰撞，漫游之后插入到了HD中间，才把HD中的H原子拐走。这是一种非常奇特的反应通道。

这两条不同类型的反应途径所产生的氢分子，在特定的散射角度汇合并产生干涉，导致反应产物氢分子产生了有规律的振荡。孙志刚表示。尤其有趣的是，在所研究的碰撞能范围，通过漫游插入机理而发生的反应只占全部反应性的很小一部分（0.3%）。而如此微弱的反应通道却能够与主要反应通道之间呈现清晰而奇特的量子干涉效应。

进来的H原子（黑色），在围绕HD分子中的D原子转了一圈之后，从HD分子中间通过，带走了HD分子的H原子，形成H<sub>2</sub>分子，从而完成了化学反应。这是一条首次发现的相当奇特的反应通道。（来源：中国科学报崔雪芹 刘万生）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/science.abb1564>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：杨学明等 来源：《科学》

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