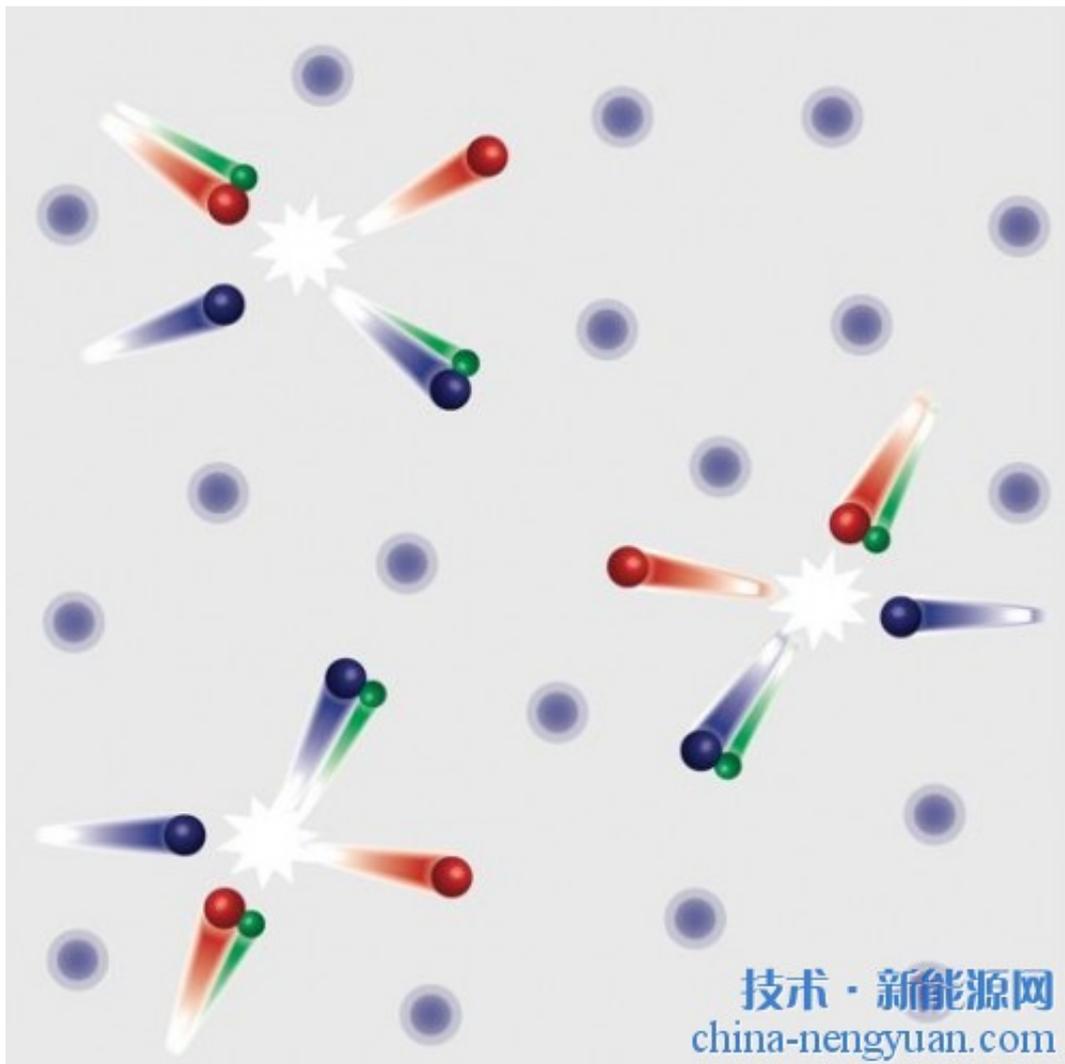


## 中国科大在超冷化学量子模拟研究上取得重要进展



图：超低温下弱束缚分子和原子之间发生的态态化学反应

中国科学技术大学潘建伟教授及其同事赵博、陈宇翱等在超冷分子和超冷化学量子模拟研究领域取得重要进展，他们首次在实验上直接观测到超低温下弱束缚分子与自由原子间发生的态态的化学反应，实现了可控态态反应动力学的探测，从而向基于超冷分子的超冷量子化学的研究迈进了重要一步。7月4日，这一重要研究成果以研究长文的形式发表在国际权威学术期刊《自然·物理学》上 [Nature Physics 13, 699 – 703 (2017)]。

量子计算和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。对化学反应和材料进行建模是量子计算最先可能的应用之一。借助量子模拟，研究者可以在人工可控的环境中研究数百万计的候选，大幅减少在真实材料中开展试验而投入的时间和资金。如同诺贝尔物理学奖获得者、麻省理工学院的Frank Wilczek教授在《今日物理》(Physics Today)发表的专题报道“未来百年的物理学”中所指出的，量子模拟“将成为化学和材料科学的核心工具。”

可控化学反应动力学的一个重要方向是对弱束缚分子化学反应的研究，这一问题可以追溯到约40年前。早在1978年，化学家W. Stwalley就曾指出弱束缚分子具有非同寻常的反应性质，它的反应会选择性通过一个反应通道进行。但由于弱束缚分子常温下不能存在，长期以来这一预言一直无法得到实验检验。近年来，随着超冷原子分子技术的发展，超低温的弱束缚分子可以从接近绝对零度的原子气中被制备出来，从而使得对其化学反应性质的实验研究成为可能。

在接近绝对零度的温度下，分子的德布罗意波长远大于相互作用的尺寸，因此化学反应完全由量子力学所主导，诸如量子散射、量子统计等量子效应将显著的改变化学反应的行为。超冷化学的研究为探索化学反应的机理和动力学提供了前所未有的量子态分辨率、能量分辨率和可调控性。近年来，超冷化学的研究取得了系列重要实验进展，例如，2010年，美国科学院院士D. Jin和叶军的联合实验小组观测到了超低温下铷钾基态分子之间的化学反应；奥地利因斯布鲁克大学的R.Grimm小组报道了弱束缚铯分子发生的化学反应等。然而，这些实验都只能测量反应物的损失，而无法对反应的产物的进行观测。迄今为止，超低温下态态化学反应尚未被实验实现。

在该项研究成果中，中国科学技术大学的研究团队首次成功观测到了超低温下弱束缚的分子和原子发生的可控态态的化学反应。在实验中，他们巧妙的利用弱束缚分子的束缚能可以调节的特性，精确控制反应中释放的能量，实现了对反应产物的囚禁。在此基础上，他们利用精密的射频场操作技术，成功探测了反应的分子产物和原子产物，并进一步研究了态态反应动力学。实验结果证实了弱束缚分子之间化学反应通道的选择性，验证了W. Stwalley约40年前的预言。

该实验的重要意义在于，这是第一次在超冷化学反应中观测到态态的化学反应，从而将化学反应动力学的实验研究推进到量子水平。这一工作得到了《自然·物理》审稿人的高度评价：“探测超冷化学反应的产物是目前该领域的重大研究目标，本工作向这个目标迈出了第一步”；“该工作是超冷化学领域的一个重要的里程碑，将引起化学和物理研究者的广泛兴趣”。

该研究工作得到了自然科学基金委、科技部、中科院等单位的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/110955.html>