

作者：王丹红 来源：科学时报 发布时间：2008-10-31 3:2:48

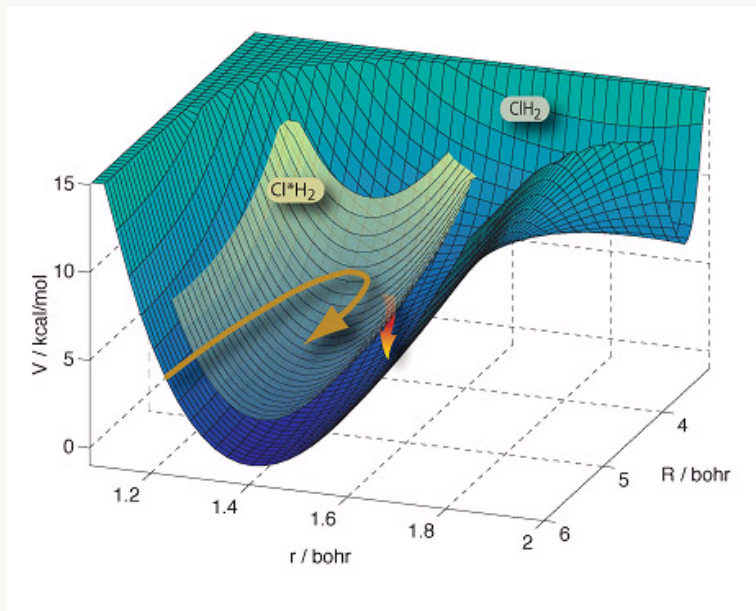
小字号

中字号

大字号

杨学明小组：波恩—奥本海默近似在氟加氢高能反应中有效

该成果发表于10月24日《科学》



氟加氢反应过程中两个势能面之间的耦合使得非绝热过程在这一反应中在低能反应变得重要。(图片由Millard Alexander教授提供)

[科学时报 王丹红报道] 波恩—奥本海默近似是分子物理、量子化学和量子物理研究中有效且常用的基础手段。一年前，中国科学院大连化物所科学家与合作者在实验中发现，在低碰撞能下，波恩—奥本海默近似在氟加氟反应中完全失效；如今，同一研究小组的科学家们证实，波恩—奥本海默近似在氟加氢高能反应中有效。新成果发表在10月24日出版的美国《科学》杂志上。

该论文的审稿人评价道：“毫无疑问，这项实验工作是对氟加氢这一反应体系迄今为止最好的一项实验研究，理论研究也非常杰出”，“这项工作解决了一个长期具有争议的氟加氢反应中激发态和基态相对反应性的问题”。美国化学会在10月27日出版的美国《化学与工程新闻》(Chemical & Engineering News) 周刊对这项研究工作进行了报道。

该项研究负责人之一、分子反应动力学国家重点实验室研究员杨学明表示，这一发现解决了长期以来化学动力学领域一个极具争议的难题，是非绝热过程动力学研究中的一项具有重要学术意义的工作。

20世纪初，美国著名物理学家、后来成为“原子弹之父”的奥本海默和他的导师、德国著名物理学家玻恩共同提出了玻恩—奥本海默近似。该近似也称为定核近似或绝热近似，它基于这样一个事实：电子与核的质量相差极大，当核的分布发生微小变化时，电子能够迅速调整其运动状态以适应新的核势场，而核对电子在其轨道上的迅速变化却不敏感。这种近似是量子化学和凝聚态物理学中的一种常用方法，用于对原子核和电子的运动进行退耦合。大多数的计算化学研究中都隐含使用了这个近似，但其正确性只能靠精确的实验来检验。

杨学明说，分子体系中非绝热过程是自然界经常发生的化学物理现象。这些过程在生命和自然的演化、大气化学以及各种激发态过程中非常重要。比如，人类和其他生物之所以能看到世界上美丽的景物，就是由于视网膜上的感光分子在受光激发到电子激发态之后的非绝热过程所引起的。但是，在实验和理论上要精确研究非绝热动力学过程是一个异常困难的课题。

氯加氢反应是一个重要基元化学反应。近年来，氯原子自旋—轨道激发态的反应特性一直是一个备受争议的课题。在早先的实验研究中，科学家们发现，即使在很高的碰撞能量下，氯原子自旋—轨道激发态的反应性也要比基态高很多。这一实验结果与当今最为精确的动力学理论结果有非常大的差异。这一结果对波恩—奥本海默近似在高碰撞能量下的有效性提出挑战，使得氯加氢反应的非绝热动力学研究成为一个备受关注的研究课题。

杨学明领导的实验小组利用实验室自行研制的、先进的氢原子里德伯态飞行时间谱—交叉分子束仪器，对氯加氢的交叉分子束反应进行了精确的实验研究，测量了氯原子激发态和基态与氢分子反应的相对微分截面。他们的实验结果发现，在低碰撞能下，氯原子自旋—轨道激发态的反应性与基态的相当。这一结果说明，波恩—奥本海默近似在这一重要反应中在低碰撞能时是失效的；但当碰撞能增加时，研究人员发现，氯原子自旋—轨道激发态的反应性与基态的相比变得越小，这说明波恩—奥本海默近似在这一重要反应中在高碰撞能量时是有效的。

与此同时，美国马里兰大学教授亚历山大与大连化物所教授张东辉、南京大学教授谢代前等人合作，在多个耦合的精确势能面上进行全量子散射的动力学计算，其理论计算的结果与杨学明小组的实验结果吻合得相当好。

杨学明认为，这项研究证实，波恩—奥本海默近似虽然在氯加氢反应中低碰撞能下是失效的，但在高碰撞能下还是有效的，表明在三原子非绝热动力学的理论研究方面已经达到了非常高的精度。

《科学时报》 (2008-10-31 A1 要闻)

[更多阅读 \(英文\)](#)

[《科学》论文摘要](#)

发E-mail给:



[打印](#) | [评论](#) | [论坛](#) | [博客](#)

读后感言:

发表评论

相关新闻

[杨学明等四人获颁周光召基金会杰出青年基础科学奖](#)

[利用电压改变折射率 日证明水具有普克尔斯效应](#)

[以色列首次实现用气体存储图像](#)

[沈致远: 我们应该怎样进行弦论研究](#)

[07诺贝尔物理学奖评委会主席: 从诺奖看基础科学...](#)

[PRL: 大连理工大学薛冬峰小组超硬材料研究获重...](#)

[英杂志列出曾被认为不可能的十大科学任务](#)

[《科学》: 透过石墨烯—瞥精细结构常数](#)

一周新闻排行

[中国政法大学副教授课堂上被男生砍死 学校发讣告](#)

[教育部公布2008年国家级教学团队名单](#)

[杨振宁: 孤独不是我的个性 没遇到翁帆也会再婚](#)

[DNA之父沃森探访清华: 你们的发现很有趣!](#)

[首届“丘成桐中学数学奖”揭晓](#)

[教育部2009年研究生教育创新计划项目开始申报](#)

[袁隆平回访母校西南大学 在校成绩首次曝光](#)

[访《科学》总编辑: 中国的科学技术正在不断进步](#)