

最简单化学反应带来奇特量子干涉现象

■本报记者 崔雪芹 刘万生

随着微观粒子各种量子现象研究的不断开展,量子力学的大厦逐渐搭建起来。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具体。

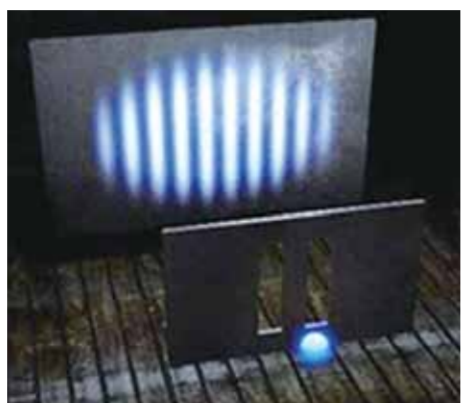
近日,《科学》在线发表中科院大连化学物理研究所(以下简称大连化物所)分子反应动力学国家重点实验室(以下简称实验室)杨学明和张东辉两位院士团队最新研究成果。他们在对“最简单”的化学反应氢原子加氢分子的同位素反应的研究中,发现了一种不常见的量子干涉效应,并且利用这一量子干涉效应首次揭示了化学反应中远低于锥形交叉点的几何相位效应。

“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奇特化学反应机理。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、大连化物所研究员孙志刚说。

因为“测量”而精确

如果从钻木取火算起,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。然而迄今为止,人类对化学反应的理解仍是粗浅的。在很多人眼中,化学仍然是一门半经验的科学。



光波的双缝干涉

孙志刚供图

这种情况正在发生变化。正如实验室新完成的这项工作,科学家们通过结合实验,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。

研究团队通过不断改进交叉分子束实验装置,极大地提高了实验分辨率,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,最终在反应中成功捕捉到了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,计算机机会告诉他具体的

化学反应过程。”论文作者之一、大连化物所研究员肖春雷说。

化学反应的“量子性过程”

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,氢原子加氢分子及其同位素的反应是最简单的。该体系只涉及三个电子,因此能够精确计算出这三个电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,从而在微观层面上深入理解化学反应过程。

基于前期的研究,孙志刚和博士生赵海林通过理论模拟发现,在特定散射角度上,H+HD反应生成的产物氢分子的多少会随碰撞能而呈现特别规律的振荡。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+HD反应这么有规律。

捕捉反应中的“蛛丝马迹”

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。“该研究在理论

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出强烈的有规律的振荡现象。

研究人员进一步采用经典轨道理论进行分析,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被称为“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的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。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.abb1564>

发现·进展

华中农业大学

番茄条纹颜色形成分子机制获揭示



绿熟期和红熟期的番茄果实条纹

华中农大供图

本报讯(记者李晨)近日,《新植物学家》在线发表了华中农业大学教授张余洋团队最新成果。该团队成功克隆了番茄果实颜色GS基因位点,揭示了转录因子TAGL1调控番茄果实颜色形成的分子机理。

园艺果实色彩斑斓是由于叶绿素和类胡萝卜素等色素多样性积累。色素不均匀分布使番茄果实表面产生条纹表型。例如,在番茄绿熟阶段,叶绿素在果实表面差异性积累,呈现绿条纹和浅绿条纹随机分布;红熟阶段,类胡萝卜素不同组分及其含量差异造成番茄表面条纹产生。

该研究中,通过对515份番茄核心种质资源性状调查发现,其中7份材料果实表现为条纹表型。因此条纹性状属于稀有变异。

研究团队克隆并鉴定了TAGL1基因调控番茄条纹的形成,并证实番茄条纹表型为隐性性状,由单基因控制。

在条纹突变体gs中,利用转基因技术获得的TAGL1超量转基因系和敲除系的果实都表现为无条纹表型。在绿熟阶段,相比对照gs,超量系果实表皮中叶绿素含量显著性减少,敲除系果实表皮中叶绿素含量显著性增加,这与TAGL1在浅绿条纹和绿条纹中的差异性表达相吻合。

在条纹番茄品种中,TAGL1仅在果实中差异性表达,产生了条纹表型,丰富了番茄果实颜色类型。研究团队开发了分子标记可用于辅助选择育种。

相关论文信息:<https://doi.org/10.1111/nph.16705>

中科院地球环境研究所等

490万年前塔里木盆地存在间歇性湖泊群

本报讯(记者张行勇)中科院地球环境研究所、香港大学、中科院地质与地球物理研究所、兰州大学相关研究人员开展合作,通过对中科院院士安芷生主持的大陆环境钻探项目获取的塔里木盆地1000米岩芯碳酸盐碳同位素和粒度记录,揭示了塔克拉玛干沙漠700万年以来的详细沙漠化历史。相关研究成果近日发表于《地质学》。

该研究结果表明,大约490万年前,塔里木盆地还存在间歇性湖泊群,气候明显比当代湿润,证实了周围山体的隆起扩张对水汽的阻隔作用。湖泊群消失后,塔里木盆地仍然交替出现风成沙丘、河流相和浅湖相沉积,并持续了很长一段时间。塔克拉玛干沙漠的最后永久性沙漠形成于距今70万年~50万年前,响应全球中新世气候转型时期的气候变化。青藏高原山地冰川的出现和大气环流的变化,可能控制了中新世转型以来亚洲内陆永久沙漠的形成和极端干旱化。

研究者通过与黄土记录的对比,还发现中新世转型以前塔里木盆地与黄土高原呈现相同的干湿气候变化特征,但在中新世转型以来,塔里木盆地干旱化加剧与黄土记录的东亚季风增加揭示干湿变化呈反向发展趋势。

据相关专家介绍,该研究成果可能为理解东亚季风演化和西部干旱化的耦合关系提供新思路。

相关论文信息:<https://doi.org/10.1130/G47406.1>

中科院大气物理研究所等

新研究让氨气分子被动采样器更准确

本报讯(记者卜叶)近日,中科院大气物理研究所、中科院沈阳应用生态研究所等单位合作,对欧洲、美国和中国广泛使用的被动采样器开展了适用性评估。结果显示,AL-PHA-Analyst和Radiello这3种被动采样器得到的氨同位素具有一致性,但它们的采样结果都显著低于扩散管主动采样系统。这一结果提示氨气同位素分子扩散引起了氮同位素分馏效应。相关研究成果在线发表于《大气研究》。

近年来,我国大气中硝酸盐浓度居高不下。为进一步改善空气质量,中国开始实施氮减排。为了揭示大气氨浓度变化及其来源规律,基于扩散吸附原理的被动采样器被广泛用于大气氨浓度测量中,并成为全球大气氨观测网络的标配。然而,被动采样器表征大气氨同位素的可靠性一直是个国际难题。

进一步理论计算发现,由于轻同位素和重同位素分子量不同,它们在空气中扩散的速率也不同,这造成了氨同位素的分馏,导致重同位素含量降低了17.7%,这与在北京实际大气中观测到的下降15.4%的差异非常接近。

研究人员认为,校正气体分子扩散中的同位素分馏效应将大幅提升被动采样测量数据的可靠性,促进被动采样器在气态污染物同位素溯源研究中更广泛应用。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2020.105018>

简讯

智汇行动概念验证创新大赛启动

本报讯 近日,由中科智汇工场主办的智汇行动概念验证创新大赛正式启动,来自中科院相关研究所的项目进行了线上路演。

据悉,本次中科智能制造专场路演以早期概念验证项目挖掘为核心,将梳理出一批中科院相关院所具有前瞻性的项目,同时邀请产业园区、投资机构、行业龙头企业、产业专家共同担任路演的评委。

大赛将增强对全国创新发展的辐射带动作用,加快构建“高精尖”经济结构,完善建设基础前沿科技成果在创意新颖性、可行性、商业性方面的全链条早期概念验证体系,填补我国科技成果转化过程中对于起步期成果支持服务的力度不足等缺憾。(郑金武)

金域医学核酸检测累计超过700万例

本报讯 新冠肺炎疫情发生以来,金域医学投入相关专业人员近1800人,累计进行核酸检测超过700万例。

据了解,2019年金域医学继续深化科技创新,研发投入超3亿元,占营业收入的6.15%,可提供的医学检验和病理诊断项目达到2700多项,保持全国领先。其罕见病精准诊断研究项目之一《罕见病实验诊断关键技术研究与规模应用》荣获2019年广东省科技进步奖一等奖。(朱汉斌)



“云巴”示范线项目在重庆亮相

6月3日,一台“云巴”在专用运行轨道上进行调试。

近日,重庆市首条“云巴”示范线项目在重庆璧山区正式亮相。此次发布的“云巴”采用电能驱动,具有转弯半径小、爬坡能力强、噪声低、安全性高、建设成本低、建造周期短等优势,能为乘客提供更智能、舒适、便捷的出行体验。据介绍,璧山区“云巴”示范线项目自2019年8月开工,线路正线全长15.4km,共设车站15座,预计2020年9月全线通车。

新华社记者刘潺摄

弘扬西迁精神 服务创新型国家建设

■王铁军

2020年4月22日,习近平总书记到西安交通大学(以下简称西安交大)考察调研,并发表重要讲话,指出“西迁精神”的核心是爱国主义,精髓是听党指挥跟党走,与党和国家、与民族和人民同呼吸、共命运。总书记的重要讲话思想深邃、内涵丰富,高度肯定了西迁精神和西安交大发挥的作用,为教育战线及新时代知识分子指明了爱国奋斗的方向,是建设中国特色一流大学的根本遵循。

1896年,南洋公学诞生于民族危亡之际,“兴学强国”开创我国工程教育源头。1921年正式定名为交通大学,1956年积极响应党中央号召,以“向科学进军,建设大西北”为集结号内迁西安,开启了建设西部科技高地的征程,彻底改变了中国西部高等教育的格局。

纵观历史,大学发展始终与社会紧密相联。进入新时代,大学如何办?中国特色一流大学如何建?这都是值得深入思考的命题。

中国要强盛、要复兴,就一定要大力发展科学技术,努力成为世界主要科学中心和创新高地。

总书记的系列重要论述,是建设中国特色一流大学的根本遵循。中国大学首先要

服务于创新型国家建设、服务于科技强国建设、服务于人民过上好日子、服务于中华民族的伟大复兴、服务于全人类的文明进步。

高水平科技创新是一流大学的显著特征,是一流学科的重要支撑,是一流人才培养的根本保障。在新的历史方位下,一流大学要彻底将教学功能转变为育人功能,要全方位育人,更加注重科研育人,培养专家型教师队伍;一流大学要不断强化科技创新能力建设,成为国家创新体系的重要组成部分;一流大学还要强化积极向上的文化引领及服务社会功能。

弘扬西迁精神,就是要根植胸怀大国的爱国主义情怀,服务国家战略。落实总书记指示,就是要树立为民族、为人民的家国情怀,将自身发展与国家大局紧紧连在一起,担负时代和民族使命,落实党中央加快建设创新型国家、建设科技强国的战略部署。西安交大以总书记系列重要讲话精神为指引,开展以“爱国主义、集体主义、英雄主义、乐观主义”为核心的思想文化建设,提出了“扎根西部、服务国家、世界一流”的办学定位;以“三个面向”为遵循,建设中国西部科技创新港,突出学科交叉、资源共享、重大需求牵引,构建校一院一所三级科研组织模式;形成高端人才

高地、科学研究高地、成果转化高地,聚焦基础科学、能源革命、现代制造业、人工智能、大数据、新材料、航空航天、生命科学等;布局建设一批研究院、大科学装置群、大型仪器设备共享中心、重点实验室和工程中心等,着力打造全国重要的科技创新中心,力争成为国家科技创新体系的重要组成部分。

弘扬西迁精神,就是要牢固树立艰苦奋斗的作风,牢记创新是引领发展的第一动力,作出重大创新成果。基础研究是整个科学体系的源头,一流大学要成为基础研究的主力军、作出引领性重大基础原创成果,就必须发扬艰苦奋斗的作风,要有创新意识,坐冷板凳的恒心、必胜的信心;要牢记关键核心技术是要不来、买不来、讨不来的,加强应用基础研究,通过开放、合作、多学科交叉、协调创新,攻克关键共性技术、前沿引领技术,实施颠覆性技术创新,为国家排忧解难,实现自主可控。两手抓,两手都要硬,既鼓励自由探索,更强调有组织的科学研究,通过体制机制改革推动内涵式发展,把高校建设成为重大科研成果的策源地。

弘扬西迁精神,就是要培养富有科学精神、创新精神、胸怀国家和人民的建设

者与接班人。一流大学要牢固树立创新驱动的实质就是人才驱动的观念,要凸显科研育人,通过高水平科研活动,真刀真枪地干,建设政治素质过硬、知晓国情民情、业务能力精湛、育人水平高超的专家型教师队伍;通过科学活动,培养学生的爱国情怀与集体主义、科学精神与科学素养、创新精神和创新能力、实干与苦干的作风,使学生真正成为全面发展的社会主义建设者和接班人。

弘扬西迁精神,就是要崇尚实干、苦干的奉献精神,杜绝形式主义和官僚主义。空谈误国,实干兴邦。西迁精神中的“艰苦创业”就是实干与苦干这种奉献精神的最好写照,是老一辈知识分子的优良传统,是青年一代的楷模。只有撸起袖子加油干、奋不顾身拼命干,才能培养出胸怀国家和人民的建设者与接班人,做出重大创新成果、服务国家战略,才能为“两个一百年”奋斗目标实现中华民族伟大复兴作出属于我们这一代的杰出贡献。

古人云:不谋万世者,不足谋一时;不谋全局者,不足谋一域。我们要仰望星空,更要脚踏实地,要牢记总书记嘱托,将西安交大的名字深深烙印在民族复兴的光荣榜上!(作者系西安交通大学副校长)