

激光辐射控制化学反应

周道其 编译

很多年以来,化学家们总试图借助于激光来控制化学反应过程,可是一直没能成功.但是利用激光照射物质时产生的精细量子效应,就可以达到这一目的.

化学在上一世纪已取得令人瞩目的成就,从此以后化学的主要技术方法几乎没有什么变化.化学反应仍是通过用各种催化剂或提高温度、压力来破坏原有的化学键,从而产生新的物质.但是,所有这些方法都不考虑分子自身的能量,分子能量储存在组成分子的原子运动中.结果在化学反应特别是在大规模工业生产中,除了想要的产品之外,还会产生大量有害的甚至有毒的物质.

最近,研究人员发明一系列借助于激光控制化学反应过程的新方法.所有这些方法利用的都是量子力学基本原理,其要点是基本粒子具有波动性质,而一切振动和波动同样又具有粒子性质.

在1965年发明激光器之后不久便开始应用激光来控制化学反应.激光辐射具有严格确定的频率,从而能准确规定输送给参加反应的分子的能量,这能量与激光频率成正比.分子中的原子联系不紧密,它们能以一定频率振动,振动频率取决于原子之间的化学结合力与它们所吸收的能量.

量子力学把原子与分子本身的这些振动看作声场的量子——声子.物理学家们认为,选择激光辐射频率,能成功地减弱或破坏确定的化学键,只有对所需类型的化学反

应才有激活作用.但是这种方法仅找到非常有限的应用:可以激活只有一种确定化学键的振动,而且只有在这种化学键与其他键相分离时才行.这种情况极少发生,极大多数化学键互相作用,从一方获得的能量会迅速传送给整个分子.总之,这与利用传统方法大致相同,而传统方法要廉价得多,例如采用直接加热的方法.

原理上全新的方法是从大约10年前开始的研究中发展起来的,当时化学家们试图利用不考

虑相干性的激光特性.

在家用光源中,如家中的白炽灯,每个原子的辐射与其原子无关,因此灯丝发出的全部光线均由各种波长辐射的无序混合组成.这种光称之为非相干光.在激光器中,所有原子都一起同步地辐射,从而产生相干辐射.如果是普通的非相干光波,当它们彼此叠加时,一定会一片均匀明亮;如果是相干光波,当它们叠加时会互相加强或互相抵消,这样叠加的光波称为干涉.因为原子、离子和电子都具有波的特性,它们都能发生干涉现象,这一点早已被理论和实验所证实.

由于这一原因,分子状态(总之任何微观粒子:原子、质子、电子等)

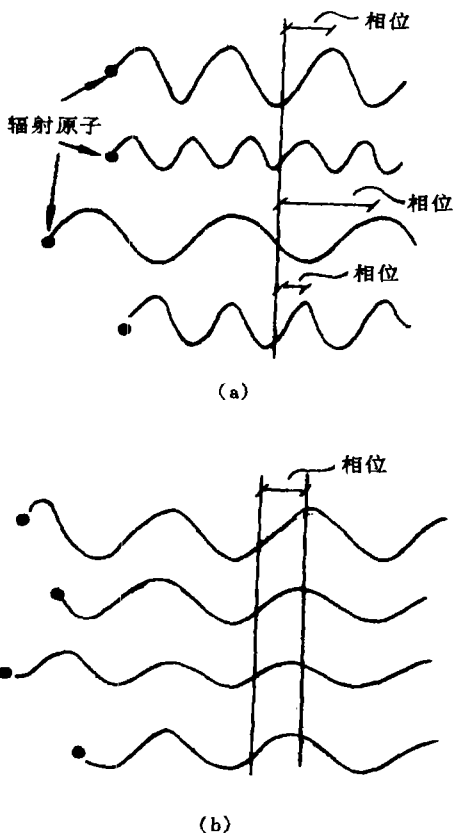


图1 在普通光源如电灯中,激发态原子发出的能量彼此无关,每个独立原子发出的光波叠加是完全无序的(见a图).在激光器中,所有原子发出的光波相位相同,这样的光称之为相干光(见b图)

在数学上可用具有物理意义的波函数来描述,波函数包容了微观粒子一切可能的信息,这是量子力学的基本方法。

但这并不意味着波函数马上可以给出分子或粒子一切参数的最精确值——量子力学规律不允许这样。例如,在微观世界中不能准确地指出粒子坐标,而只能计算出它位于给定位置的几率。波函数给出粒子参数的几率,其中包括它来到最有可能发现粒子地方的几率值。在相互作用时,粒子彼此改变自己的状态,粒子的波函数像相干波一样互相叠加和发生干涉。对粒子的任何一种作用,甚至在普通测量中都会改变粒子的波函数,因此微粒的一切特征具有某些不确定性。

不妨假设分子由3部分组成——单个原子或原子团,分别称它们为A、B和C。现在设想用两种方法把分子ABC分解成为原子:分解之后成为A—B或B—C两部分,同时形成A和BC一对原子或AB和C一对原子。为了分开化学键,需要向分子传送能量,例如用一定频率的激光照射它。当分子吸收严格确定频率的光量子即能量之后,分子ABC会转入激发态,然后分解成两种化合物。

如果辐射频率减小三分之二,则会怎么样呢?结果发现光量子能量减少三分之二,分子只有吸收3个光量子之后才会发生分解。

假如用两束不同频率的激光同时照射ABC分子,则马上会产生与两种不同分子状态相对应的两个波函数。叠加时它们会发生干涉,彼此加强或减弱。因为每个波函数确定系统转变成另一状态的几率,它们的总和反映化学反应的可能进程。干涉状况取决于两束原始激光的相对振幅和相位,并且在各种振幅与相位组合情况下很容易发生变化。各种总的波函数导致分子ABC分解成A+BC或AB+C化合物。

上述进程不需要大功率激光,甚至彼此相干的两束弱激光也可以对化学反应过程发生极重要的作用。几年前加拿大多伦多大学科学家用分解双原子分子一溴代碘(IBr)实验研究了这些过程。一溴代碘分子分解成碘和溴有两种方式:分解成普通的 $\text{I} + \text{Br}$ 元素或分解成碘和

激活的溴原子。选取具有相对强度和相位的两束激光,在分子分解成从25%到95%的反应产物时,能成功地增加激活原子溴的产量。须知在生产中若有10%产量的改变,即可认为是很好的结果。

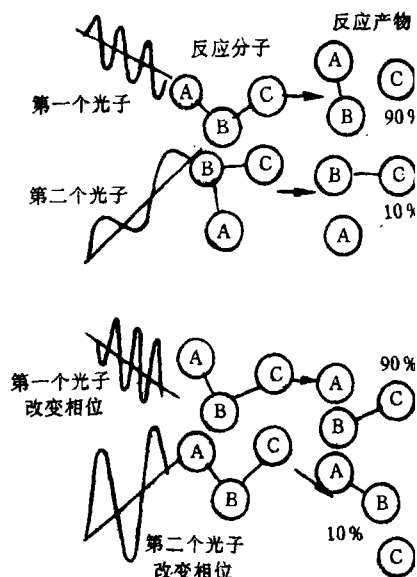


图2 用两束具有不同光子能量的激光同时照射化合物时,可以控制化学反应。例如,分子ABC在吸收具有一定能量的光子或具有1/3能量的光子时会发生分解。

调节激光的相对振幅和相位时,可以改变反应结果

激光辐射控制化学反应的方法已被应用于我们周围的大量物质。但是要推广这一新工艺至少还有两个障碍。第一,当原始分子波函数的相位不可预料地随温度和压力的增加——在工业生产条件下发生改变,则它的效率会明显下降。因此目前只能对低压气体中相互作用的分子采用这一新工艺。

第二个障碍与激光的相位有关,激光相位会随时间或由于电源电压的微小变化而发生改变。但是存在消除这一障碍的纯量子效应即所谓的非线性效应。其实质在于,通过透明物质的激光会同其分子发生作用并发生散射。如果激光强度足够大,则在散射光中会出现比入射光频率高2倍、3倍、4倍甚至更高频率的辐射。例如红色激光在压缩氢气或氮气中散射时,会在其中出现更高频率的辐射。

如用超短激光脉冲代替连续激光辐射,则

为化学或物理学开辟了十分诱人的前景.超短激光脉冲具有各种频率即具有各种能量光子的大量组合.此外,压缩成超短脉冲的激光辐射具有极强的功率(10^{12}W).所有这些不仅能改善实验技术和化学工艺,而且能建立新的科学研究方向.

严格地说,为了更有效地对分子发生作用,需要利用由两个脉冲组成的序列.第一个脉冲使分子进入激发态,迫使其原子振动和转动.新的波函数确定分子对第二个脉冲如何反应,分子分解成怎样的产物.

不同分子状态分布(波函数)取决于相位.

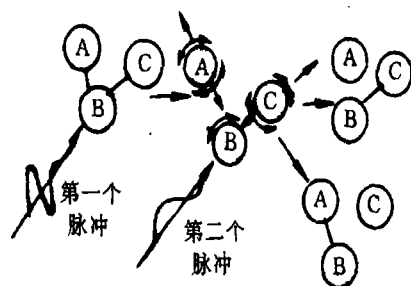


图3 用一对激光脉冲照射分子时可以改变化学反应过程.第一个激光脉冲使分子进入激发态,也就是迫使分子的原子来回振动或转动.振动或转动的振幅和频率取决于分子与激光的特性.第二个激光脉冲引起分子分解,反应的差异可检验,同时改变两脉冲间隔与分子碎片的振动频率

两脉冲宽度以及两脉冲间隔,两脉冲可以在最宽范围内轻易改变.实验表明,在分解成各部分简单分子时,产物的相对数量从3%到95%改变,实际上一种反应几乎可以完全停止.对于复杂的多原子分子而言,激光化学方法不是这样有效,但是也是具有良好的前景.

激光化学方法在制药工业中找到了广泛应

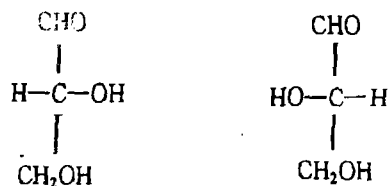


图4 以两种镜像对称结构形式(L型和D型)

存在的一种氨基酸——左右对称体

用.同一种维生素分子或药物分子常常以两种形式存在:像左右对称体一样出名的L型和D型.它们的化学成分完全相同,而分子结构彼此不同,它们看上去彼此就像左右手的镜像.在人体起反应的生物分子中通常具有不对称结构,由此看来人体能更好地消化L型化合物,而消化D型化合物要差得多,其中一种化合物在生物学上常常是活泼的,而另一种是不活泼的,甚至是有毒的.

L型和D型化合物可以分离,但是这一过程很复杂.例如它可以成为分选由各种方式生长的非对称晶体的基础.激光控制合成反应可以快而简单地制取所需排列方向的分子.

以波函数干涉为基础的方法比控制化学反应或检验化学反应方法更有用处,它们将成为新型工艺的基础,为目前基本上还难以实现的方法提供基本原理.在本世纪初建立的量子力学能使化学家和物理学家了解微观世界,并认识其规律.现在被动观察的作用已过时,21世纪量子力学将为控制分子水平乃至原子水平的作用过程提供前所未有的手段.

(译自俄《科学与生活》95-9)

· 书讯 ·

《物理学名词(1996)》

全国自然科学名词审定委员会公布的物理学名词(第二批)已经出版.物理学名词审定委员会(主任赵凯华,副主任李国栋、徐锡申)着重对近二三十年物理学各科出现的基本词进行了慎重定名,同时对第一批名词作了一些修订,合并为《物理学名词(1996)》.按照国家科委、科学院、教委、新闻出版署联合发布的文件的

规定,书中公布的基本词均系规范词,书后列有全部词条的英汉、汉英对照.

欲购买《物理学名词(1996)》的读者,请将书款汇至:100871 北京大学物理系教务办公室,联系人:郝建华,联系电话:(010)62757393.该书单价为56元/本,邮费5.6元/本.开户行:北京城市合作银行清华园支行.户名:北京今日长城书店.帐号:201020838-61.欢迎广大读者订购!