

A Journey of Simulating Gauge Field with Cold Atoms

翟荟
清华大学

Email: huizhai.physics@gmail.com

Abstract: I will review the developments of simulating gauge field with cold atoms in the past decades. For abelian gauge field, it starts from a constant gauge field to synthetic electric or magnetic fields. The later progress is to simulate density dependent gauge field, and the density fluctuation introduces dynamics to gauge field. On the other hand, the dynamical gauge field requires local gauge symmetry. I will discuss the emergent many-body localization in dynamical gauge field. For non-abelian gauge field, it introduces effects of spin-orbit coupling and topological bands. I will discuss how to detect the topological effects from dynamical processes.

Dynamics on discrete time crystal in a finite chain of cold Rydberg atoms

范楚辉; 吴金辉
东北师范大学物理学院

Abstract: We study the collective dynamics of two realistic clean Floquet systems based on a regular chain of about 10 Rydberg atoms. These atoms interact via the nearest-neighbor van der Waals couplings and are driven by a periodically turned on and off laser field. Numerical simulations show that the population evolution and its Fourier spectrum display clear signatures of a discrete time crystal (DTC) in the absence of disorder. We find in particular the appearance of a robust subharmonic oscillation which persists on a time scale increasing with the chain size in a wide range of control parameters. We also characterize how the DTC stability is affected by the dissipative processes, typically present in this atomic system even though the high Rydberg state is very long lived.

Key words: Discrete Time Crystal; Rydberg Atoms; Clean Floquet System

Ref: Chu-Hui Fan, D. Rossini, Han-Xiao Zhang, Jin-Hui Wu, M. Artoni, G. C. La Rocca; Discrete time crystal in a finite chain of Rydberg atoms without disorder; arXiv: 1907.03446v1.

基于热原子系综的量子调控和精密测量

陈丽清

华东师范大学物理与材料科学学院，上海闵行区东川路 500 号

Lqchen@phy.ecnu.edu.cn

摘要：我们近期基于热原子系综中的光和原子相互作用发展了一些量子调控方法和精密测量方法。首先，量子存储是量子信息处理必不可少的部件，核心指标有存储效率、存储时间、存储带宽、信息保真度以及系统可小型化等。以往人们已经提出很多种光和原子相互作用过程用于实现量子存储，如电磁诱导透射 (EIT)、梯度回波存储 (GEM)、拉曼存储等，并且已有很多实验报道实现了高效率的 EIT 和 GEM，存储带宽为 MHz 量级。拉曼存储天然具有高带宽的优势，但是目前存储效率仅为 40%。我们研究了拉曼散射过程中的时间模式，通过优化控制强光场的时间模式和空间模式，实现了带宽达到 200MHz、效率达到 82%、保真度为 98% 的量子信息存储^[1]；然后，原子磁力计是当今国际精度最高的磁场测量方法，我们基于热原子系综中的法拉第旋转效应，发现信号光中信号强度和噪声大小与相位有关系，通过加入相位片，调节本地振荡场和信号光场之间的相位，在地磁场量级磁场环境下，将磁场测量精度提高了 10dB^[2]。热原子系综相对于冷原子系综，装置简单稳定，更易于实用化。

关键词：量子存储，热原子系综，拉曼散射，原子磁力计

参考文献：

1. Jinxian Guo, Xiaotian Feng, Shuying Chen, L. Q. Chen, Chunhua Yuan and Weiping Zhang, High-performance Raman quantum memory with optimal control in room temperature atoms, *Nature Communications*, 10, 148 (2019).
2. Guzhi Bao, Shuhe Wu, Shuqi Liu, Wenfeng Huang, Ziran Li, L.Q. Chen*, Chun-Hua Yuan, and Weiping Zhang, Enhancement of the Signal-to-Noise Ratio of an Atomic Magnetometer by 10 dB, *Phys. Rev. Applied*, 11, 054075 (2019).

利用 Stark 减速技术产生冷分子及其应用

张栋栋*

吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012 中国

* Email: dongdongzhang@jlu.edu.cn

摘要: Stark (斯塔克) 减速器作为产生冷分子的重要手段已经广泛地应用到分子碰撞、分子反应、精密测量以及分子囚禁并进一步冷却。我们提出了多次减速的方案来提高 Stark 减速器的减速效率, 得到了相比于传统方法三倍的分子数密度和降低一半的分子束温度^[1]。将 Stark 减速器产生的冷分子应用在分子光谱精密测量上, 我们研究了 OH 自由基分子的磁偶极 (M1) 跃迁, 并首次在分子体系中观察到了电偶极跃迁 (E1) 和磁偶极跃迁的相干效应^[2]。在中性分子囚禁的研究中, 结合 Stark 减速技术和中性分子磁阱囚禁技术将中性分子在分子阱中的寿命提高到分钟量级, 为研究低温下分子碰撞反应铺平了道路。

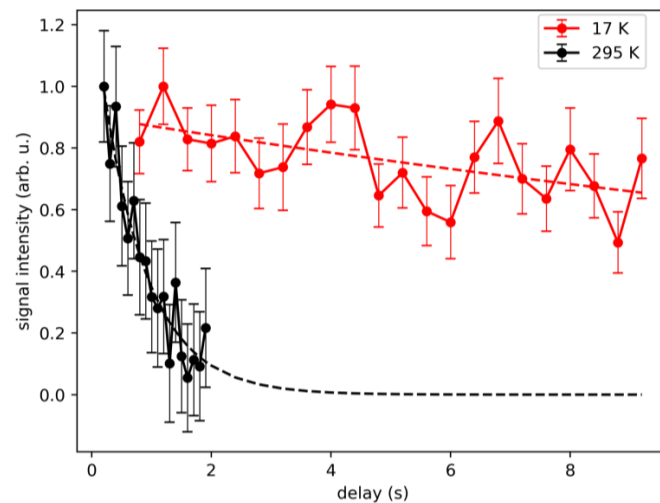


图 1 中性分子磁阱中 OH 自由基分子在室温下囚禁 700 ms (黑色圆点), 在 17 K 低温下囚禁长达半分钟 (红色圆点)。图中虚线为对实验结果的拟合。

关键词: 冷分子; 分子减速; 分子囚禁; 精密测量

参考文献

- [1] D. Zhang, G. Meijer, and N. Vanhaecke, "Advanced switching schemes in a Stark decelerator," *Phys. Rev. A* 93, 023408 (2016).
 [2] H. C. Schewe, D. Zhang, G. Meijer, R. W. Field, B. G. Sartakov, G. C. Groenenboom, A. van der Avoird, and N. Vanhaecke, "Stark Interference of Electric and Magnetic Dipole Transitions in the A – X Band of OH," *Phys. Rev. Lett.* 116, 153001 (2016).

微型光阱中单个冷分子的相干合成

王坤鹏、何晓东、郭瑞军、许鹏、盛诚、庄军、刘敏、王谨、詹明生

中国科学院武汉物理与数学研究所, 武汉 430071

Email: hexd@wipm.ac.cn, mszhan@wipm.ac.cn

摘要: 超冷分子在超冷化学和碰撞、量子多体模拟、量子精密测量以及量子信息等方面有着广泛的应用前景。近年来, 超冷分子的研究正在取得飞速地发展, 特别是人们成功实现了冷分子气体的费米简并、观测到了超冷分子和原子之间的 Feshbach 共振、研究了微型光阱 (optical tweezers) 中两个原子间的光缔合以及制备了基态单分子的微阵列。从冷原子出发合成分子, 是制备超低温分子的最有效的途径之一, 虽然人们已经用光缔合的方法将两个冷原子制备成了单个分子, 但是制备出的单分子的温度仍然比较高, 并且量子态并不确定, 单分子的相干合成还未实现 [1]。从两个分别囚禁的异核铷原子出发, 为了高效地合成单分子, 需要将两个原子制备在一个势阱的基态上, 为此, 我们发展了原子依赖的转移方法, 克服了转移过程中的加热问题 [2]。我们用特殊的微波跃迁实现了单分子的相干合成, 观察到了从原子到分子的 Rabi 振荡, 超越了传统的基于 Feshbach 共振或者光缔合的方法 [3]。这一工作, 为制备多个单分子、研究原子和分子以及分子和分子间的碰撞过程打下了坚实的基础。

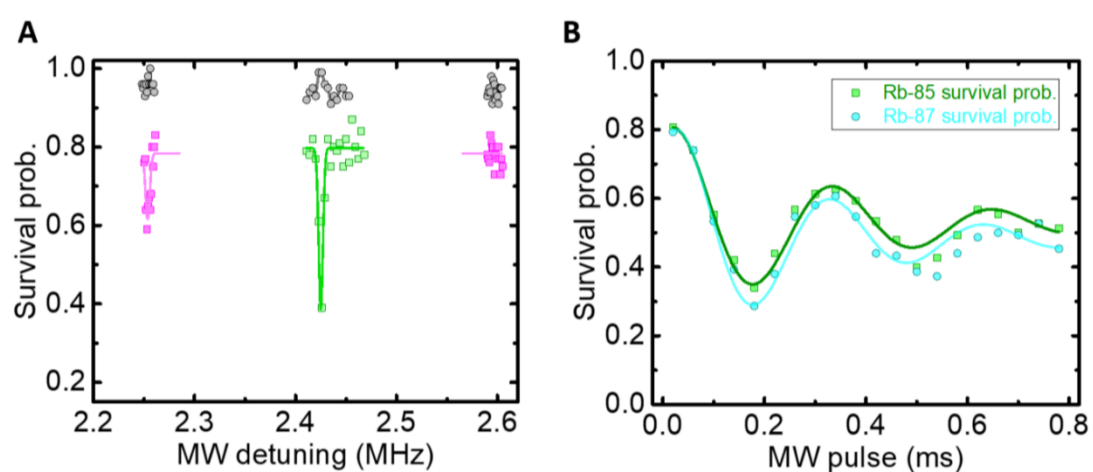


图 1 从原子到分子的微波跃迁以及 Rabi 振荡

关键词: 单分子、单原子、超冷碰撞、超冷化学

参考文献

- 【1】 L. R. Liu et al., Building one molecule from a reservoir of two atoms. *Science*. 360, 900–903 (2018).
- 【2】 K. Wang et al., Preparation of a Hetero-nuclear Two-atom System in the 3D Motional Ground State in an Optical Tweezer, Arxiv: 1902.04284.
- 【3】 K. Wang et al., Coherent formation of a weakly bond between two ultracold atoms in an optical tweezer, In preparation.

基于材料基因工程的镁基合金心血管支架的多尺度计算

蒋刚

四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065

Email: gjiang@scu.edu.cn

摘要: 基于材料基因工程的理念, 在现有实验研究和理论计算的基础上, 为了探索从计算设计预测-实验制备与表征-大数据技术相融合的研发路径, 从而实现全降解镁基合金心血管支架材料高通量计算筛选的目的, 本文从材料的原子分子设计出发, 构建了如图 1 所示的多尺度计算方案, 通过第一性原理高通量计算筛选出 Mg-M (M=Zn、Y、Ti、Al、Nd)二元合金的候选结构, 构建相关镁基合金的势函数, 利用分子动力学模拟方法揭示材料形变过程中的原子结构-性能(弹性、强度、硬度、塑性、韧性)之间的关系。基于掺杂元素筛选“三性合一”(生物相容性-韧性-均匀降解)判据, 研究了不同纳米尺度、不同掺杂比、不同晶粒尺寸 Mg-Zn、Mg-Ca、Mg-Y、Mg-Nd 二元合金的单向拉伸力学性质。经过测试确定了 2NN-MEAM 力场描述合金原子间相互作用, 2NN-MEAM 形式势函数在理论及实际应用上显示出相比其他函数形式更好的准确性。并利用泰森多边形方法实现了镁基合金的单相多晶模型的构建, 模拟了常温常压下不同掺杂比例以及掺杂方式和不同晶粒尺寸的二元固溶合金的力学性质(杨氏模量、屈服应力应变)和形变机理, 找到优越的合金掺杂比和合金晶粒尺寸, 为镁合金心血管支架构型的有限元优化设计以及实验研究提供数据支持。

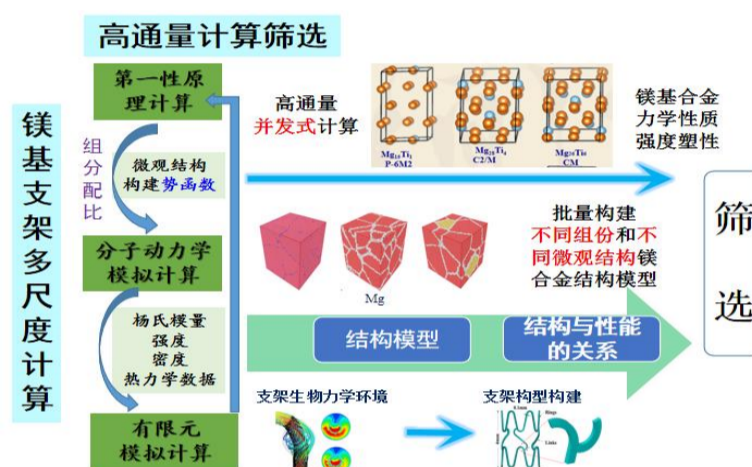


图 1. 多尺度计算方案

关键词: 材料基因工程, 多晶镁(Mg)基合金, 多尺度计算, 高通量筛选

基金项目: National Key P&D Program of China (NO. 2017YFB0702501).

光致激发态分子动力学的几个应用研究

杨勇刚、刘玉芳

河南师范大学物理学院, 新乡 453007

Email: yangyonggang@htu.edu.cn

摘要: 在光物理领域, 通过激发态和分子动力学理论模拟, 并结合瞬态光谱实验来研究分子体系的光学特性、发光及失活机理、取代基和环境影响因素等, 更重要的是其在储氢材料、吸附材料表面光诱导反应和有机长余辉发光材料等方面的应用, 将更加细致、全面、动态地分析光致激发对光谱、反应和材料性能的影响。部分代表性工作: 1> 硼烷氨类储氢材料储氢及脱氢机理 首次运用过渡态和含时密度泛函理论研究了苯酚和三甲基硼烷氨复合物通过双氢键的过渡态脱氢的反应过程, 提供了完整的理论模型; 2>光致诱导吸附材料表面性能研究 研究了官能团化的活性炭吸附乙硫醇, 介孔纸浆吸附甲基橙染料, 硅醇化二氧化硅表面吸附硫磷有毒气体, 它将光激发效应作为设计吸附材料和检测吸附性能的新标准, 并提出了吸附材料的吸附性能在基态和激发态不同的环境影响因素; 3> 咪唑-苯酮类有机长余辉发光材料 研究咪唑-苯酮类磷光分子和聚合物的光物理机理和动力学过程, 获得咪唑类(供电子)和苯酮类(受电子)单体分子系列组合对磷光性能的影响的经验关系, 指导实验设计, 提高其磷光性能。目前, 证实了闭环作用能够显著提高磷光寿命的合成策略。

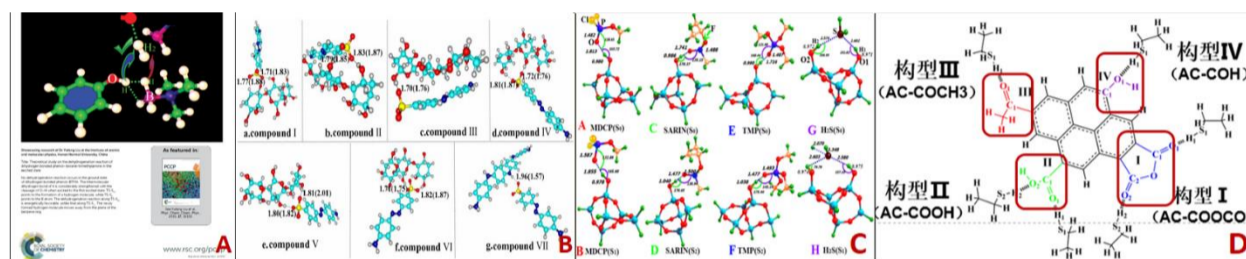


图 1:A 硼烷氨储氢脱氢研究(参考文献 1), B 甲基橙净化机理研究(参考文献 2), C 二氧化硅表面吸附研究(参考文献 3), D 活性炭吸附研究(参考文献 4)

关键词: 激发态 氢键 表面吸附 储氢 有机长磷光

参考文献

- 【1】 Y. G. Yang *et al.*, Theoretical study on the dehydrogenation reaction of dihydrogen bonded phenol- boranetrimethylamine in the excited state, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015, 17(48), 32132-32139.
- 【2】 D. L. Li *et al.*, A mechanistic study on Decontamination of Methyl Orange Dyes from Aqueous Phase by Mesoporous Pulp Waste and Polyaniline, *Environ. Res.* 2017, 154, 139-144.
- 【3】 Y. G. Yang *et al.*, Photoexcitation effect on the adsorption of hazardous gases on silica surface, *J. Hazard. Mater.* 2018, 341, 93-101.
- 【4】 H. Li *et al.*, Influences of hydrogen bonding dynamics on adsorption of ethyl mercaptan onto functionalized activated carbons: A DFT/TDDFT study, *J. Photoch. Photobio. A.* 2014, 291, 9-15.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11274096) .

Origin of Two Distinct Peaks of Ice in the THz Region

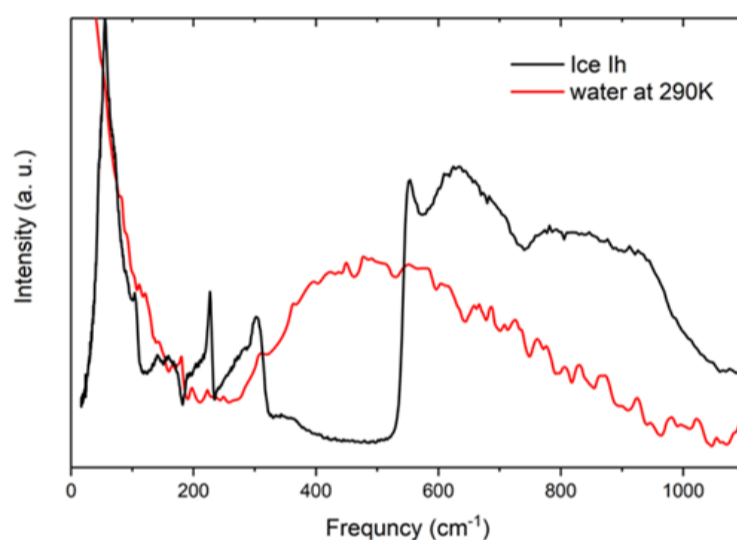
Xu-Liang Zhu, Jing-Wen Cao, Xiao-Ling Qin, Lu Jiang, Yue Gu, Hao-Cheng Wang, Yang, Liu, Alexander I. Kolesnikov, Peng Zhang*

School of Space Science and Physics, Shandong University, Weihai, 264209, China

Email: zhangpeng@sdu.edu.cn

Abstract: For liquid water in the far-infrared spectrum, the phonons of molecular vibrations constitute two bands with a narrow gap at around 30 meV. Interestingly, there are two distinct peaks for ice in this gap. We demonstrated that the two peaks come from two categories of translational modes. Considering different O-O-O bending constants, we yielded two frequencies based on ideal model of ice Ic. These two kinds of vibrational modes do not exist in liquid water due to collapse of the rigid tetrahedral structure. Thus, a window remains for ice resonance absorption with minimum energy loss in water. A new method to decompose gas hydrates was proposed by supplying two terahertz radiation energies at ~ 6.8 and 9.1 THz. This is also applicable to flow assurance in gas pipeline, aircraft deicer and so on. Experimental measurements are expected to verify this finding along with the rapid development of THz laser.

Figure 1. The absorption band of ice and water in the far-IR region. Compared with the gap at around 30 meV (from 200 to 310 cm^{-1}) of



water, a window remains for energy absorption of ice.

关键词: 氢键 DFT 可燃冰

参考文献

- [1] E. D. Sloan, *Nature*, 2003, **426**, 353.
- [2] H. C. Kim, P. R. Bishnoi, R. A. Heidemann and S. S. H. Rizvi, *Chem. Eng. Sci.*, 1987, **42**, 1645.
- [3] X. S. Li, L. H. Wan, G. Li, Q. P. Li, Z. Y. Chen and K. F. Yan, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2008, **47**, 9696.
- [4] G. Li, X. S. Li, L. G. Tang and Y. Zhang, *Energy Fuel*, 2007, **21**, 3388.
- [5] S. Hirohama, *J. Chem. Eng. Japan*, 1996, **29**, 1014.
- [6] Y. Wang and S. Dong, *Phys. Rev. B*, 2003, **68**, 172201.
- [7] A. M. Gaspar, M. A. Marques, M. I. Cabaco, M. I. D. B. Marques, A. I. Kolesnikov and J. Tomkinson, *J Phys Condens Matter*, 2004, **16**, 6343.
- [8] J. E. Bertie, H. J. Labbe and E. Whalley, *J. Chem. Phys.*, 1969, **50**, 4501.
- [9] P. T. T. Wong and E. Whalley, *J Chem Phys*, 1976, **65**, 829.
- [10] J. C. Li, D. K. Ross, L. Howe, P. G. Hall and J. Tomkinson, *Physica B*, 1989, **156/157**, 376.
- [11] M. Marchi, J. S. Tse and M. L. Klein, *J. Chem. Phys.*, 1986, **85**, 2414.
- [12] D. D. Klug, J. S. Tse and E. Whalley, *J. Chem. Phys.*, 1991, **95**, 7011.
- [13] B. Renker, E. Whalley, S. J. Hones and L. W. Gold, *Physics and Chemistry of Ice*, 1973, 82.
- [14] J. C. Li and D. K. Ross, *Nature*, 1993, **365**, 327.
- [15] J. C. Li, *J. Chem. Phys.*, 1996, **105**, 6733; Li, J. C. and Kolesnikov, A. I., *J. Mol. Liq.*, 2002, **100**, 1.
- [16] J. S. Tse and D. D. Klug, *Phys. Lett. A*, 1995, **198**, 464.
- [17] I. Morrison and S. Jenkins, *Physica B*, 1999, **263/264**, 442.
- [18] S. Klotz, T. Strassle, C. Salzmann, J. Philippe, *Europhys. Lett.*, 2005, **72**, 576.
- [19] X. He, O. Sode, S. S. Xantheas and S. Hirata, *J. Chem. Phys.*, 2012, **137**, 204505.
- [20] P. Zhang, L. Tian, Z. P. Zhang, G. Shao and J. C. Li, *J. Chem. Phys.*, 2012, **137**, 044504.
- [21] P. Zhang, S.H. Han, H. Yu and Y. Liu, *RSC Adv*, 2013, **3**, 6646.
- [22] P. Zhang, Z. Wang, Y. B. Lu, Z. W. Ding, *Sci. Rep.*, 2016, **6**, 29273.
- [23] S. J. Clark, M. D. Segallii, C. J. Pickardii, P. J. Hasnipiii and M. I. J. Probertiv, *Kristallogr* 2005, **220**, 567.
- [24] Z. Y. Yuan, P. Zhang, S. K. Yao, Y. B. Lu, H. Z. Yang, H. W. Luo, Z. J. Zhao, *RSC Adv*, 2017, **7**, 36801.
- [25] J. D. Bernal and R. H. Fowler, *J. Chem. Phys.*, 1933, **1**, 515.
- [26] K. Zhang, P. Zhang, Z. R. Wang, X. L. Zhu, Y. B. Lu, C. B. Guan, Y. H. Li, *Molecules*, 2018, **23**, 1781.
- [27] Z. R. Wang, X. L. Zhu, L. Jiang, K. Zhang, H. W. Luo, Y. Gu, P. Zhang, *Materials*, 2019, **12**, 246.
- [28] X. L. Zhu, Z. Y. Yuan, L. Jiang, K. Zhang, Z. R. Wang, H. W. Luo, Y. Gu, J. W. Cao, X. L. Qin, P. Zhang, *New J. Phys.*, 2019, **21**, 043054.
- [29] Y. Gu, X. L. Zhu, L. Jiang, J. W. Cao, X. L. Qin, S. K. Yao, P. Zhang, *J. Phys. Chem. C*, 2019, **123**, 14880.
- [30] V. F. Petrenko and R. W. Whitworth, *Physics of ice*, 1999, 56.
- [31] J. E. Bertie and E. Whalley, *J. Chem. Phys.*, 1967, **46**, 1271.
- [32] P. Faure, *J. de physique*, 1969, **30**, 214.
- [33] J. Niskanen, *Proc Natl Acad Sci USA*, 2019, **116**, 4058.
- [34] S. Sastry, *Phys. Rev. E*, 1996, **53**, 6144.
- [35] J. C. Palmer, F. Martelli, Y. Liu, R. Car, Panagiotopoulos, A. Z. and Debenedetti, P. G., *Nature*, 2014, **510**, 385.
- [36] A. Khalatpour, J. L. Reno and Q. Hu, *Nat. Photonics*, 2019, **13**, 47.

Realization of single-photon Rydberg excitation of cesium atoms by using of a narrow-linewidth
318-nm UV laser

Jiandong BAI(白建东), Shuo LIU(刘硕), Zerong WANG(王泽荣), Jun HE(何军), and Junmin WANG (王军民) *

State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices,
and Institute of Opto-Electronics, Shanxi University

*E-mail: wwjjmm@sxu.edu.cn

Abstract: Highly-excited Rydberg atoms have played important roles in quantum information processing and quantum optics. The long lifetime, large dipole matrix element, and strong interaction between neighboring Rydberg atoms make the Rydberg blockade mechanism ideal for quantum memory and quantum computing. Employing the self-designed 2-W UV laser system, we demonstrated the single-photon Rydberg excitation spectroscopy of cesium (Cs) atoms from $6S_{1/2}$ ground state to $71P_{3/2}$ Rydberg state with a purely optical detection method. We observed the Autler-Townes doublet and Zeeman spectra in velocity-selective spectra in room-temperature vapor cell. Additionally, utilizing trap-loss spectra we observed clearly that Rydberg excitation was partially suppressed due to long-range interactions between Rydberg atoms in a cold atomic ensemble. Furthermore, we observed and analysed the Stark map of Rydberg states in a DC electric field, and then inferred the background DC electric field from the measured Stark splitting. Next step, we will implement the magic-wavelength optical dipole trap to confine both the ground-state and Rydberg-state Cs atoms in order to maintain coherent character. Based on the multi-level model, we firstly analysed and calculated light shifts for $6S_{1/2}$ ground state and $nP_{3/2}$ Rydberg state of Cs atoms.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No.61475091, 61875111)

References

- [1] Jiandong BAI, Jieying WANG, Shuo LIU, Jun HE, and Junmin WANG*, "Autler-Townes doublet in single-photon Rydberg spectra of cesium atomic vapor with a 319 nm UV laser," *Appl. Phys. B*, 125(3), 33 (2019).
- [2] Jieying WANG, Jiandong BAI, Jun HE, and Junmin WANG*, "Single-photon cesium Rydberg excitation spectroscopy using 318.6-nm UV laser and room-temperature vapor cell," *Opt. Express*, 25(19), 22510-22518 (2017).
- [3] Jiandong BAI, Jieying WANG, Jun HE, and Junmin WANG*, "Electronic sideband locking of a broadly tunable 318.6nm ultraviolet laser to an ultra-stable optical cavity," *J. Opt.*, 19(4), 045501 (2017).
- [4] Jieying WANG, Jiandong BAI, Jun HE, and Junmin WANG*, "Development and characterization of a 2.2 W narrow-linewidth 318.6-nm ultraviolet laser," *J. Opt. Soc. Am. B*, 33(9), 2020-2025 (2016).
- [5] Jiandong BAI, Shuo LIU, Jieying WANG, Jun HE, Junmin WANG*, "Single-photon Rydberg excitation and trap-loss spectroscopy of cold cesium atoms in a magneto-optical trap by using of a 319-nm ultra-violet laser system," *arXiv:1811.05092v2*.

各向同性超冷费米原子气体的动力学研究

武海斌

华东师范大学精密光谱科学与技术国家重点实验室，上海 200062

Email: hbwu@phy.ecnu.edu.cn

摘要： 理解组成系统的粒子之间具有强的相互作用的复杂量子系统的动力学是当前多体物理中重要的难点之一。超冷费米原子气体由于 Feshbach 共振技术、光学晶格和合成规范场等技术的发展，使其成为一个理想的多体系统去研究这些基本的问题。目前“传统”的超冷量子气体囚禁在谐振子阱中，原子密度和长度单位存在着空间变化，为热力学依靠关系，特别是其相关临界问题的研究带来很大的挑战性。通常解决的方案是采用局域密度近似方案，物理规律的抽取依赖于整个原子气体的平均，其可能会掩盖甚至定性地改变实验结果，如在研究超冷量子气体关联长度发散时的临界动力学问题时 LDA 近似就有着很大的局限性。在这个报告中，我们将介绍我们目前在各项同性均匀费米量子气体研究的进展。利用 DMD 光束整形技术，实现了各项同性的超冷费米原子气体，通过精确调控其相互作用，精确的测量其热力学量，直接观察到了费米动量分布，研究其普适的多体动力学。

关键词：费米原子气体，多体物理，量子操控

资助项目：国家自然科学基金（11374101, 91536112, 11704126）

【1】 A.L. Gaunt, T.F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R.P. Smith, and Z. Hadzibabic, Phys. Rev. Lett. 110, 200406 (2013).

【2】 B. Mukherjee, Z. Yan, P. Patel, Z. Hadzibabic, T. Yefsah, J. Struck, and M. Zwierlein, Phys. Rev. Lett. 118, 123401 (2017).

基于双光子态的时域-频域傅立叶变换的实验研究

金锐博

武汉工程大学 光电信息与能源工程学院, 武汉 430205

Email: jrbqyj@foxmail.com Homepage: www.qubob.com

摘要: 基于自发参量下转换过程产生的双光子态是量子光学研究中常用的量子光源。双光子态的时域和频域特性与傅立叶变换紧密相关。本报告介绍我们在双光子态时域-频域傅立叶变换方面的一些工作: (1) 双光子的差(合)频分布与其时域 Hong-Ou-Mandel 干涉(NOON 态干涉)条纹分布是一对一维傅立叶变换关系, 该关系由扩展的维纳-辛钦定理描述。实验结果表明, 纠缠光子对之间的合频信息可以通过对 NOON 型干涉条纹做傅立叶变换得到, 而差频信息可以通过对 HOM 型干涉条纹做傅立叶变换得到[1]。 (2) 双光子的联合频域分布(JSA)与其联合时域分布(JTA)之间是一对二维傅立叶变换关系, 我们首次通过测量双光子的频域和时域分布来研究双光子的时频对偶性。实验结果表明双光子的频谱分布满足傅立叶变换限制条件, 而单光子的分布则不满足此限制条件 [2]。 (3) 我们在实验上对二维频域空间中的双光子波包的频率和相位进行了调控, 通过测量双光子频谱分布和 Hong-Ou-Mandel 干涉来确认调控的效果, 该工作中使用的技术将为实现多光子波包整形、任意量子波形合成器奠定基础[3,4]。

关键词: 双光子态 时域-频域特性 傅立叶变换

参考文献

- 【1】 Rui-Bo Jin, Ryosuke Shimizu "Extended Wiener-Khinchin theorem for quantum spectral analysis" *Optica* 5, 93-98 (2018)
- 【2】 Rui-Bo Jin, Takuma Saito, Ryosuke Shimizu "Experimental demonstration of time-frequency duality of biphotons" *Physics Review Applied* 10, 034011 (2018)
- 【3】 Rui-Bo Jin, Ryoji Shiina, Ryosuke Shimizu, "Quantum manipulation of biphoton spectral distributions in a 2D frequency space toward arbitrary shaping of a biphoton wave packet," *Opt. Express* 26, 21153 (2018)
- 【4】 Rui-Bo Jin, Neng Cai, Ying Huang, Xiang-Ying Hao, Shun Wang, Fang Li, Hai-Zhi Song, Qiang Zhou, Ryosuke Shimizu "Theoretical investigation of a spectrally pure-state generation from isomorphs of KDP crystal at near-infrared and telecom wavelengths" *Physics Review Applied* 11.034067(2019)

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 91836102, 11704290) 等

Hetero magnetism with ultracold spinor gases in optical lattices

李永强, 龚明, 袁建民
 国防科技大学理学院物理系, 长沙 41000, 湖南
 Email: li_yq@nudt.edu.cn

Abstract: We investigate heteronuclear mixtures of ultracold spin-1 bosons in a cubic optical lattice. For this purpose we develop a generalized bosonic dynamical mean-field theory, which reliably describes the full range from small to large coupling. Rich phase diagrams of the system are mapped out, which contain superfluid, spin-singlet insulator, and nematic, cyclic, charge-density-wave and ferromagnetic phases, and are understood by an effective-spin model. We find that heteronuclear spin-change processes lead to additional magnetic phases, pronouncedly stabilized against pairing states as a result of suppressed quantum fluctuations. Our simple model is an example of large-spin systems that can stabilize spin-ordered phases and opens up new possibilities for the experimental realization of exotic phases.

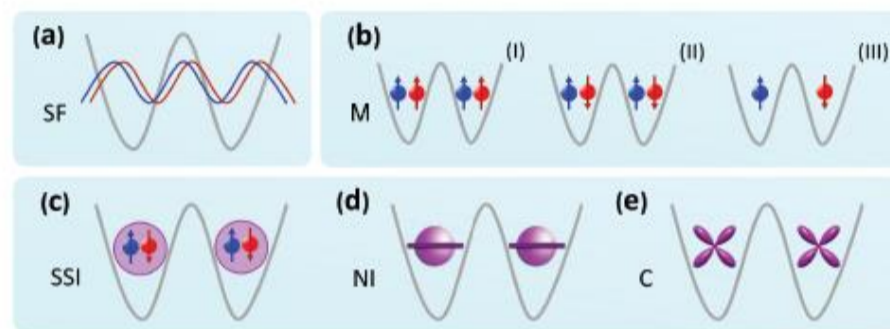


图 1: 光晶格中超冷原子体系的相图

关键词: 超冷原子, 光晶格, 大自旋体系

【1】 Yongqiang Li, Ming Gong and Jiamn Yuan, Hetero magnetism with ultracold spinor gases in optical lattices, arXiv: 1711.01203.

通过 $B^1\Pi_1$ 短程态在最低振动基态产生超冷 RbCs 分子

刘妤婷^{1,2}、宫廷^{1,2}、姬中华^{1,2}、王高仁³、
赵延霆^{1,2}、肖连团^{1,2}、贾锁堂^{1,2}

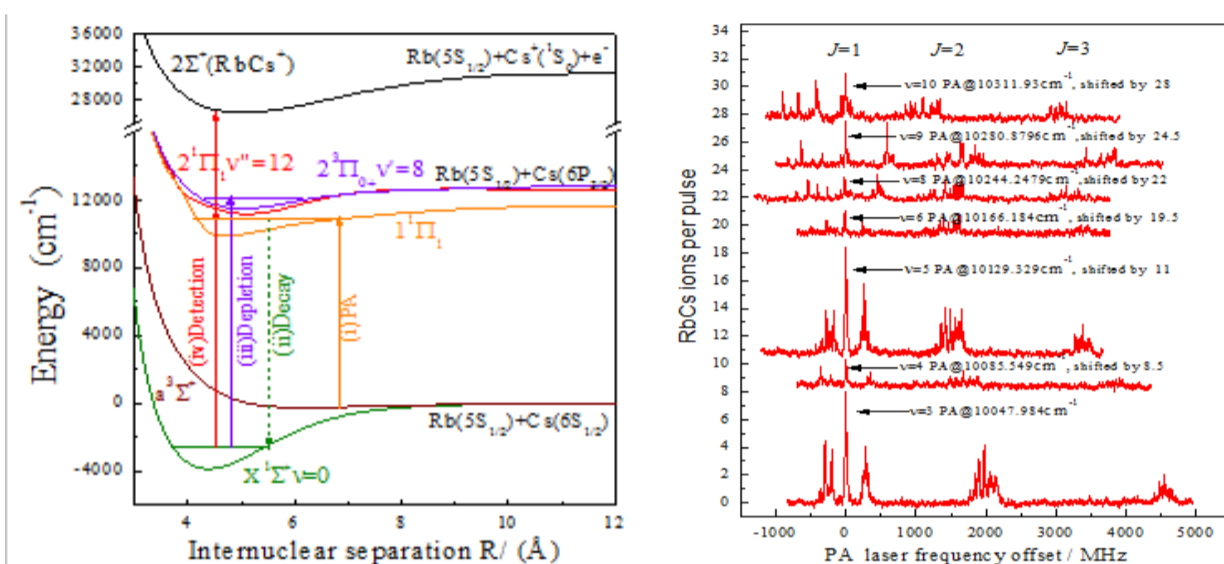
1.山西大学国家重点实验室激光光谱研究所, 太原 030006

2.山西大学极端光学协同创新中心, 太原 030006

3.大连理工大学大学物理学院, 大连 116023

Email: jzh@sxu.edu.cn (姬中华) zhaoyt@sxu.edu.cn (赵延霆)

摘要: 我们研究了利用 $B^1\Pi_1$ 短程态在最低振动基态产生了 $^{85}\text{Rb}^{133}\text{Cs}$ 分子。通过高灵敏的飞行时间质谱得到了 $B^1\Pi_1$ 态的光缔合光谱(PA 谱), 其中包括新观察到的两个振动能级光谱。根据这些 PA 谱得到了振动态的谐波常数与非谐波常数, 根据这些常数可以预测其他振动态能级(不确定度在 $1\sim 2\text{ cm}^{-1}$)。计算得到由 $B^1\Pi_1(v=3, J=1)$ 产生的基态分子的产率比之前 $2^3\Pi_0^+(v=10, J=0)$ 得到的基态分子产率大三倍。此外根据损耗光谱技术得到了通过 $B^1\Pi_1$ 态($v=3, J=1$)产生 $X^1\Sigma^+(v=0)$ 的转动态的布居以及它们之间的跃迁电偶极矩(值为 $7.2(2)\times 10^{-3}e a_0$), 理论预测了以 $B^1\Pi_1$ 态为原子分子之间受激拉曼绝热转移(STIRAP)的效率(0.02%), 为接下来研究双色光缔合光谱提供了实验基础。



关键词: 超冷 $^{85}\text{RbCs}$ 分子、最低振动基态、短程光缔合、受激拉曼绝热转移

资助项目: 国家重点研发项目(2017YFA0304203)、国家自然科学基金(61675120, 11434007, 61875110)、国家自然科学基金优秀科研队伍项目(61121064), 山西省“1331 项目”重点学科建设, 长江学者和创新团队发展计划(IRT-17R70)、111 项目(D18001)和国家重点实验室开放项目量子光学和量子光学器件(KF201814)

参考文献:

- 【1】 T. Shimasaki, J. T. Kim, Y. Zhu, and D. DeMille. Phys. Rev. A **98**, 043423 (2018).
- 【2】 K. Aikawa, D. Akamatsu, M. Hayashi, K. Oasa, J. Kobayashi, P. Naidon, T. Kishimoto, M. Ueda, and S. Inouye. Phys. Rev. Lett. **105**, 203001 (2010).
- 【3】 Z. Ji, Z. Li, T. Gong, Y. Zhao, L. Xiao, and S. Jia. Chin. Phys. Lett. **34**, 103301 (2017).
- 【4】 P. D. Gregory, P. K. Molony, M. P. Köppinger, A. Kumar, Z. Ji, B. Lu, A. L. Marchant, and S. L. Cornish. New Journal of Physics **17**, 055006 (2015).

国产化小型磁选态铯原子钟的研制历程及技术现状

陈江, 马沛, 王骥, 马寅光, 张涤新, 李得天, 刘志栋, 崔敬忠

兰州空间技术物理研究所, 兰州 730000

Email: chernjiang@aliyun.com

摘要: 小型磁选态铯原子钟具有频率准确度高, 长期稳定性好的特点, 可用于科学研究、导航、时间频率的计量、守时和授时等领域。小型磁选态铯原子钟 (简称铯钟) 涉及多项关键技术, 国内对其攻关持续了几十年。2006 年, 兰州空间技术物理研究所在国家相关部门的支持下开展铯钟研制; 2010 年, 突破了包括束光学优化在内的多项关键技术, 研制出铯钟原理样机; 2011 年, 铯钟原理样机 1s~10000s 稳定度达到技术要求; 2012 年, 铯钟原理样机十万秒稳定度达到 $8.5E-14$; 2013 年, 5 天稳定度达到 $5E-15$; 2015 年, 突破了长寿命关键技术, 评估后认为铯钟寿命将超过 5 年; 2018 年, 研制出星载铯原子钟飞行件。本交流报告主要讲述兰州空间技术物理研究所国产化小型铯原子钟研制历程及目前达到的技术水平, 并同国内外同类型铯原子钟作对比分析。

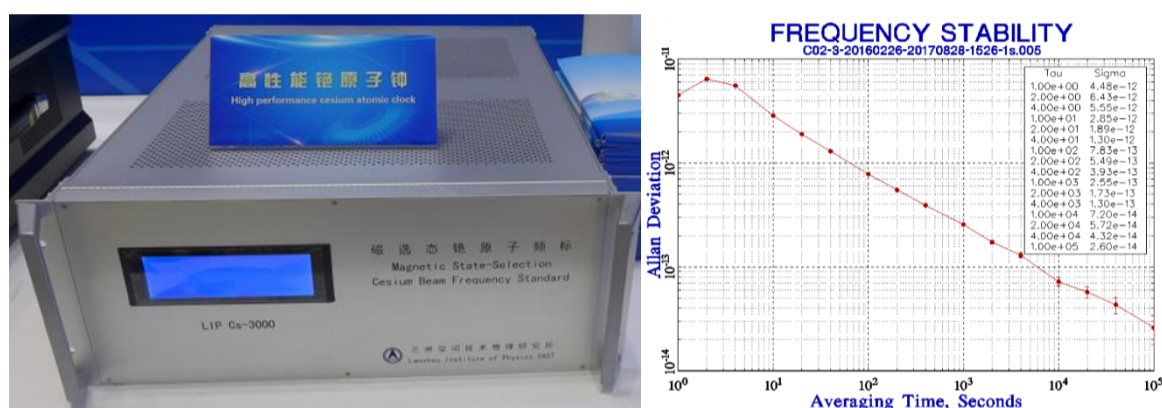


图 1 磁选态铯原子钟及 Allan 方差曲线

关键词: 磁选态铯原子钟, 铯束管, 稳定度

Coulomb-induced ionization time lag after electrons tunnel out of a barrier

Y. J. Chen, X. J. Xie, C. Chen, G. G. Xin, and J. Liu

College of Physics and Information Technology, Shaan'xi Normal University, Xi'an 710119, China

Abstract: After electrons tunnel out of a laser-Coulomb-formed barrier, the movement of the tunneling electron can be affected by the Coulomb tail. We show that this Coulomb effect induces a large time difference (longer than a hundred attoseconds) between the exiting time at which the electron exits the barrier and the ionization time at which the electron is free. This large time difference has important influences on strong-field processes such as above-threshold ionization and high-harmonic generation, with remarkably changing time-frequency properties of electron trajectories. Some semi-quantitative evaluations on these influences are addressed, which provide new insight into strong-field physics and give important suggestions on attosecond measurements.

原子分子强场隧穿电离的非绝热效应研究

黎敏、刘昆陇、罗四强、谢文海、曹伟、张庆斌、兰鹏飞、周月明、陆培祥

华中科技大学物理学院与武汉光电国家研究中心, 武汉 430074

Email: mli@hust.edu.cn

摘要: 隧穿是强激光场与原子分子相互作用最基本的过程之一, 由于隧穿可以触发许多有趣的强场物理现象, 如高次谐波和非次序双电离等, 所以隧穿出口处电子初始动量对后续过程的理解至关重要, 同时初始动量也与隧穿电离的非绝热效应密切相关。但是这一动量很小, 且隧穿电子在激光场中加速获得很大的漂移动量, 很容易将初始动量的作用掩盖掉, 因此实验上很难观测到隧穿电子初始动量的作用。

我们提出了两个实验方案分别对强场隧穿电子的初始横向和纵向动量进行精密测量。在第一种方案中[1], 我们采用光电子全息技术, 通过全息结构随正交双色场相位的变化重构了隧穿电子初始纵向动量。在第二种方案中[2], 通过设计两个椭圆偏振光的实验方案, 在实验上观测到了非绝热隧穿电离的特征结构。随后, 我们进一步在理论上证明了椭圆偏振激光场中隧穿电子的非绝热初始动量和激光场的瞬间转速和瞬间幅值变化存在直接对应关系[3], 并在此基础上预言了一种新的非绝热隧穿效应, 即隧穿几率最大值和激光场峰值之间可能存在几十阿秒的时间偏移[4]。

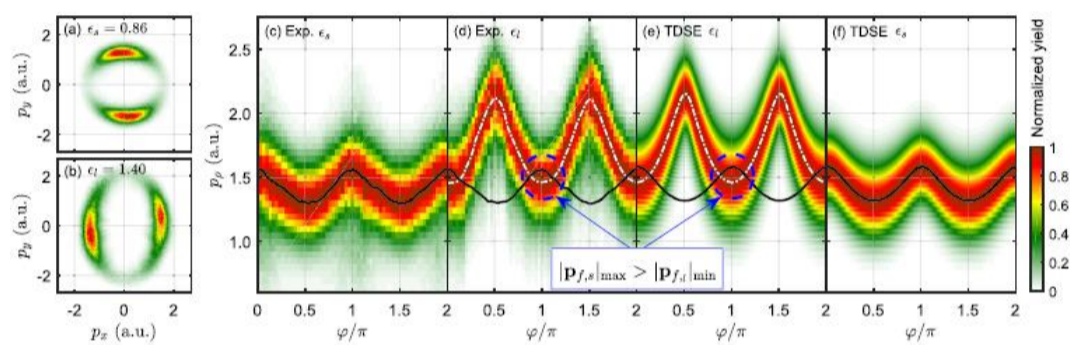


图 1 实验测量的光电子动量[(a)(b)]、动量分辨的角分布[(c)(d)]以及 TDSE 模拟结果[(e)(f)]

关键词: 隧穿电离 非绝热效应 光电子全息

参考文献

- 【1】 M. Li *et al.*, Photoelectron holographic interferometry to probe the longitudinal momentum offset at the tunnel exit, *Phys. Rev. Lett.* 2019, 122 (18), 183202.
- 【2】 K. Liu *et al.*, Detecting and characterizing the nonadiabaticity of laser-induced quantum tunneling, *Phys. Rev. Lett.* 2019, 122 (5), 053202.
- 【3】 S. Luo *et al.*, Exit momentum and instantaneous ionization rate of nonadiabatic tunneling ionization in elliptically polarized laser fields, *Phys. Rev. A* 2019, 99 (5), 053422.
- 【4】 W. Xie *et al.*, Nonadiabaticity-induced ionization time shift in strong-field tunneling ionization, *Phys. Rev. A* (in press).

CO 离子自电离态的强场电离动力学研究

李孝开¹、刘金磊²、罗嗣佐¹、赵增秀²、丁大军¹¹吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012²国防科技大学物理系, 长沙 410073Email: luosz@jlu.edu.cn, dajund@jlu.edu.cn

摘要: 原子分子与飞秒强激光场相互作用可产生很多新奇的现象, 如原子分子高激发态包括自电离态的激发。相对于原子, 分子或分子离子的自电离态更为复杂, 例如某些分子一价离子高激发态随着核间距的伸长, 其势能可以高于二价离子连续态, 从而发生自电离。这种非直接的双电离过程在极紫外光电离分子过程中已有很多研究^[1], 但强激光场中分子自电离态相关的实验结果还较少。对自电离态在强激光场电离中的时间分辨行为进行研究, 将深化对电子-核耦合影响下超快电离动力学过程^[2]的理解。

我们利用反应显微谱仪符合测量装置, 对 CO 分子在圆偏振飞秒强激光场解离性双电离中的碎片离子动量和分布以及电子-电子动能关联谱进行了测量。解离通道分辨的离子动量和不对称分布及电子能谱低能峰结果表明具有较低动能释放值 (2.8-4.8eV) 的库仑爆炸通道来源于分子离子 CO⁺ 自电离态的场电离。通过重构与电子动能相关的分子坐标系电子角分布, 得到了随分子核间距拉伸而发生演化的电离动力学过程。我们的结果表明分子离子的激发态布居对分子库仑爆炸有重要贡献, 也证明利用圆偏振光角度条纹方法可以对强场中自电离态的电子-核耦合进行研究。

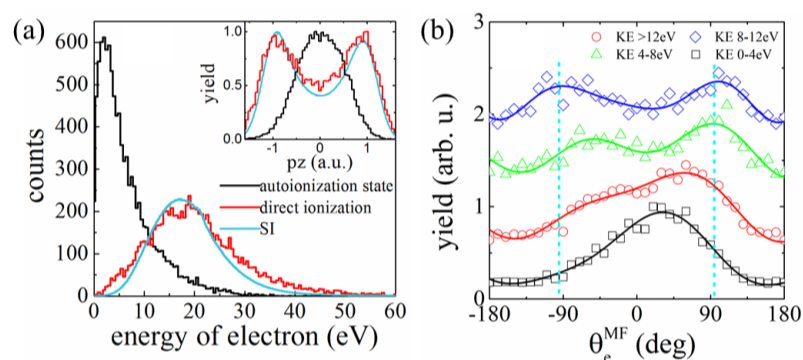


图 1 (a) 分子直接电离及自电离态电离电子动能谱, (b) 动能相关的分子坐标系电子角分布

关键词: 强场分子电离, 电离动力学, 自电离态, 符合测量

参考文献

【1】 T. Osipov *et al.*, Formation of inner-shell autoionizing CO⁺ states below the CO²⁺ threshold, *Phys. Rev. A* 2010, 81 (1), 011402(R).

【2】 M. Odenweller *et al.*, Strong Field Electron Emission from Fixed in Space H₂⁺ Ions, *Phys. Rev. Lett.* 2011, 107 (14), 143004.

基金项目: 国家自然科学基金 (NO. 11534004, 11704148, 11627807)。

Coherent driving versus decoherent dissipation in the double inner-shell ionization of neon atoms by attosecond pulses

刘建鹏*、李永强、袁建民

国防科技大学文理学院, 长沙 410073; 中国工程物理研究院研究生院, 北京 10000

Email: jpliu_noll@163.com

Abstract: Exchange correlation plays an important role in double ionization of complex atoms by ultrashort laser pulse. In this work we investigate two-photon double inner-shell electron ionization of neon induced by an attosecond extreme ultraviolet pulse in the framework of the quantum master equation. Our simulations reveal a distinct nonsequential effect via broadened double peaks, as a result of energy sharing between the two ionized electrons. When dissipation is included to show the interplay of coherence and decoherence, the two-photon double-ionization (TPDI) scaling law breaks down. Details can see Fig. 1. Our results confirm that induced decoherence from other ionization channels are modulated by XUV pulse parameters, manifesting time-dependent properties. A distinct breakdown of scaling laws reveals the importance of decoherence in inner-shell $2s^2$ TPDI. We further study the total cross section of $2s^2$ double ionization as a function of photon energy in both nonsequential and sequential regions. Besides, our simulations show the critical role of decoherence even on the attosecond scale. Due to the kinetic energy distribution and domination of intermediate states by $2s^1 2p^6$, we believe it is possible to observe $2s^2$ TPDI events in the coincidence measurement technique.

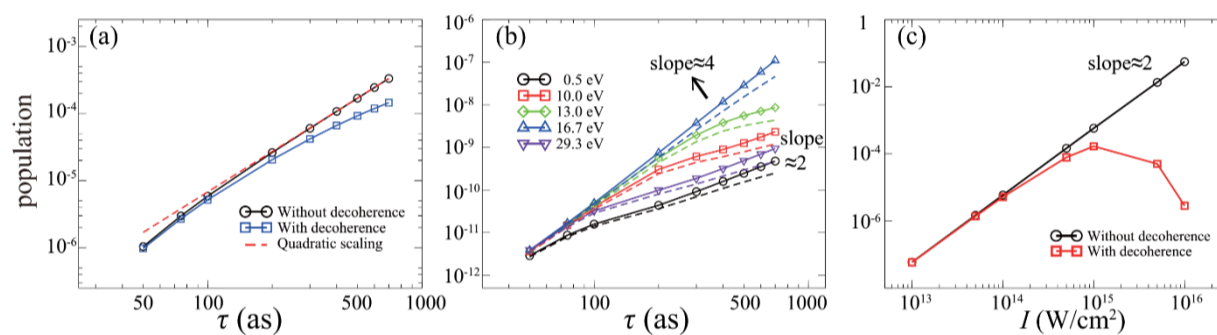


Fig. 1. A log-log plot of scaling laws of the yield of TPDI as a function of pulse duration or intensity. (a) Total yield vs duration. (b) Yields for different free-electron energies along the resonant line vs duration. (c) Total yield vs intensity.

Key Words: exchange correlations, inner-shell TPDI, attosecond pulses

Reference: [1] Jianpeng Liu, Yongqiang Li and Jianmin Yuan, Phys. Rev. A **99**, 053425 (2019).

Fund: Science Challenge Project No. TZ2018005, the National Natural Science Foundation of China (NO.11774322, 11734013)

Longitudinal Momentum of Electron at the Tunneling Exit

徐瑞华(1)(3)、李韬(2)、王旭(1)

1、中国工程物理研究院 研究生院, 北京 (100193)

2、北京计算科学研究中心, 西安 (710062)

3、北京应用物理与计算数学研究所 (100088)

Email: ruihua_xu@163.com

摘要: 原子在强激光场中可以通过量子隧穿效应发生电离。关于隧穿过程的理解有不少争议和模糊的地方, 比如电子在隧穿出口的动量问题。隧穿出口是经典允许区和经典禁止区的分界点: 在出口内侧的经典禁止区, 动能为负值; 在出口外侧的经典允许区, 动能为正值; 在隧穿出口处, 动能正好为零。于是很多模型在描述隧穿过程时, 假定隧穿出口处电子的动量为零。

但是最近的几个实验相继发现, 必须假设电子在隧穿出口处的动量不为零, 理论计算结果才能更好地符合实验结果。问题是, 电子在隧穿出口——一个动能为零的位置——的动量为什么可以不为零? 并且, 在量子力学中, 什么物理量可以描述隧穿出口——一个固定空间位置处——的动量?

我们提出概率流动量是描述隧穿出口处动量合适的量子力学物理量。并且隧穿出口处的概率流动量可以(并且一般均)不为零, 即使该点的动能为零。我们进一步指出, 这个在隧穿出口处不为零的概率流动量是一个纯粹的量子效应, 其值取决于波函数振幅在该点的形状。

关键词: 隧穿电离, 隧穿出口, 平行动量, 概率流

资助项目: 科学挑战计划 (No: TZ2018005), 国家自然科学基金 (No: 11774323)

氢分子 Lyman 带和 Werner 带光学振子强度的 dipole (γ, γ)研究

熊涛, 朱林繁

中国科学技术大学, 合肥 230021

Email: xiong06@mail.ustc.edu.cn, lfzhu@ustc.edu.cn

摘要: 氢分子是宇宙中含量最丰富的分子, 广泛存在于星体大气和星际介质中。观测和研究氢分子对我们深入了解宇宙演化和恒星形成的过程有很重要的意义。作为同核双原子分子, 氢分子的纯振转光谱很难探测, 因而研究氢分子的电子态跃迁就显得尤为重要。氢分子的质量是所有分子当中最轻的, 核的振转运动对电子运动的影响不能忽略, 绝热近似对氢分子并不完全适用。在理论计算方面, 只有 Abgrall 等的计算结果考虑了非绝热项的修正。此前实验上氢分子 Lyman 带和 Werner 带的光学振子强度只有电子碰撞方法和光吸收方法研究过。但是对于 Lyman 带, 它们的结果与 Abgrall 等的计算并不一致。本次工作中, 我们采用了新型的、基于 X 射线散射技术的 dipole (γ, γ)方法测量氢分子 Lyman 带和 Werner 带各电子振动态的光学振子强度, 并且将实验的能量分辨提高到了 25meV。我们将本次实验的结果与此前的数据进行交叉检验, 结果表明非绝热效应对氢分子 Lyman 带的光学振子强度有很明显的影响, 尤其是对于较高的振动激发态; 而对于 Werner 带, 非绝热效应的影响几乎可以忽略。

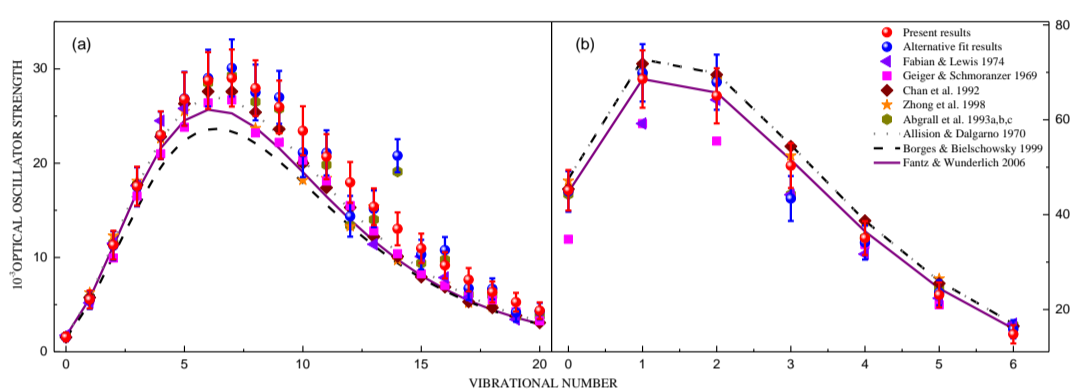


图 1. 氢分子的光学振子强度 (a) Lyman 带 (b) Werner 带。

关键词: 氢分子, 光学振子强度, 非绝热效应

参考文献

- [1] Abgrall *et al.*, The Lyman and Werner Band Systems of Molecular Hydrogen, *J. Mol. Spectrosc.*, 1993, 157, 512.
- [2] Xu *et al.*, The realization of the dipole (γ, γ) method and its application to determine the absolute optical oscillator strengths of helium, *Sci. Rep.*, 2015, 5, 18350.
- [3] Xu *et al.*, A novel approach to unfold the heavily overlapped spectrum of a diatomic molecule: Monte Carlo random walk routine, *J. Electron. Spectrosc.*, 2019, 234, 13.

低能 $N6+-He$ 碰撞中单电子俘获过程研究

许传喜 1,2、徐佳伟 1,3、朱小龙 1,3、冯文天 1、郭大龙 1,3、高永 1、张少锋 1,3、赵冬梅 1、苏茂根 2、马新文 1,3

1 中国科学院近代物理研究所, 兰州, 730010

2 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州, 730070

3 中国科学院大学, 北京, 100039

Email: zhuxiaolong@impcas.ac.cn

摘要: 高电荷态离子与原子碰撞是等离子体物理, 天体物理学, 热核剧变的一个不可忽视的过程, 其中最主要的过程是单电子俘获过程, 因此研究碰撞中的单电子俘获过程有很重要的物理意义[1]。截至到现在有很多小组已经研究关于 $N6+-He$ 的实验, 但很少研究电荷转移过程的角微分截面, 为补充该信息, 我们基于反应显微成像谱仪[2], 进行了 12.6 -120 keV 低能 $N6+-He$ 碰撞过程中单电子俘获的研究。在上述的能量范围内, 从我们得到反冲离子动量谱上可以看到单电子的主要俘获到 $n=3$ 态, $n=4$ 态的贡献很小, 而且态选择截面几乎不随能量变化而变化, 这样的结果与 Roncin 等人[3]和 Gordeev 等人[4]的实验结果一致; 我们从得到的角分布谱中发现一定的规律性, 在总角微分截面上出现了明显的双峰结构。下图是 6keV/u $N6+-He$ 碰撞中单电子俘获到 $n=3$ 的角微分截面, 红色的线是基于分子库仑过垒模型 (MCBM) [5]的计算结果。计算的第一个峰与实验结果吻合的很好, 主要来自于大碰撞参数的单电子俘获; 第二个峰与实验存在较大差别, 主要由于此经典模型的局限所致。期望与理论合作, 更好的探究双峰结构的根源。

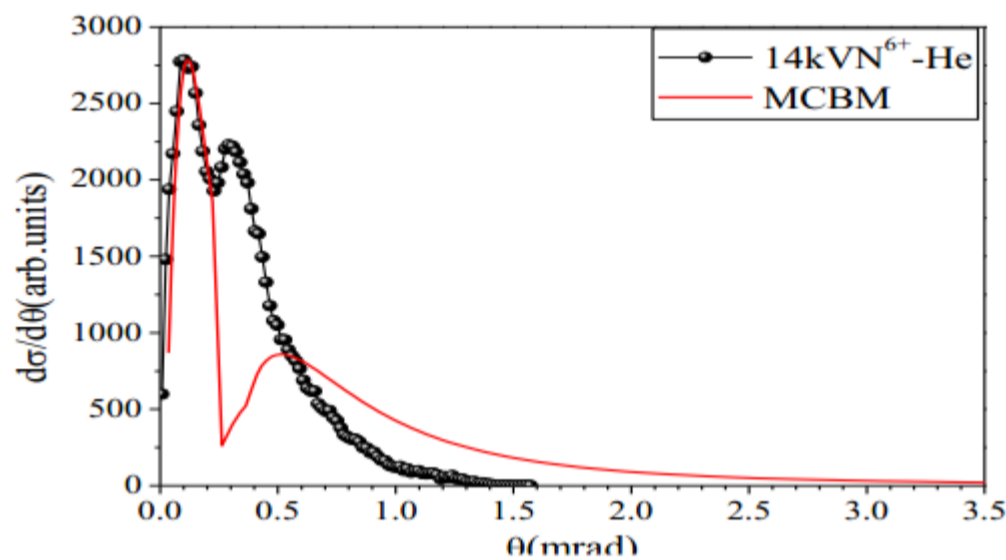


图 1. 6keV/u $N6+-He$ 碰撞中单电子俘获 $n=3$ 角微分截面。

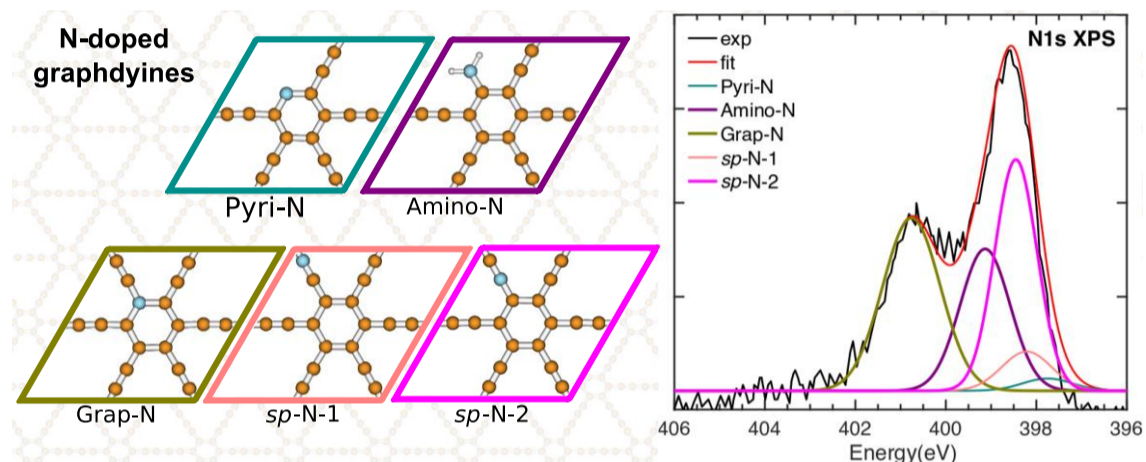
关键词: 反应显微成像谱仪, 单电子俘获, 角分布

参考文献

- [1] W Yang et al 2004. J. At. Mol. Phys. 21(4):589-593.
- [2] X L Zhu et al 2019, Nucl.Instr.Math.B, in press(<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2018.11.047>).
- [3] Roncin et al 1989. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 22(3) 509.
- [4] Gordeev et al. 1983 Phys. Rev. Lett. 50(23): 1842.
- [5] Niehaus A et al 1986 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 19 2925.

氮掺杂石墨炔局域结构的软 X 射线谱理论表征^[1]马勇¹、林娟¹、宋秀能¹、王传奎¹、花伟杰²、罗毅³¹ 山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250358² 南京理工大学理学院, 南京 210094³ 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026Email: mayong@sdu.edu.cn

摘要: 石墨炔是近年来合成的一种新型二维碳材料。该类由碳六元环及炔基组成的二维碳材料包含 sp 及 sp_2 杂化的碳原子类型, 使得该材料具有比其他碳材料更为丰富的物理和化学性质, 在催化、半导体、太阳能电池等领域具有巨大的应用前景。氮掺杂是调节二维碳材料电子结构的一种重要方法。氮掺杂石墨炔的性质与所涉及的氮掺杂的局部结构有极强的依赖性。实验上, 氮掺杂的局域结构通常采用氮原子 K 壳层的 X 射线光电子能谱 (XPS) 和近边 X 射线吸收精细结构 (NEXAFS) 确定。本工作在密度泛函理论的基础上, 精确计算了氮掺杂石墨炔的 N-1s 的 XPS 和 NEXAFS 谱。全面检测了石墨炔中五种具有代表性的氮掺杂类型, 即 pyridinic-N, amino-N, graphitic-N, 以及两种不同的 sp 杂化的 N 原子 (sp -N-1 和 sp -N-2) 的局部结构, 由此可正确标定实验谱中所有的特征谱峰。另外, 我们的计算结果亦可用于测定不同温度下石墨炔中不同氮掺杂种类的比例。研究结果为掺氮石墨炔的结构测定和对其潜在结构-性能关系的新理解提供了基础依据。

图 1 石墨炔中五种不同的氮掺杂类型及理论计算的 N-1s X 射线光电子能谱与实验谱^[2]比较。

关键词: 石墨炔 氮掺杂 X 射线光电子能谱 近边 X 射线吸收精细结构谱

参考文献

【1】 Y. Ma *et al.*, Local structures of nitrogen doped graphdiynes determined by computational X-ray spectroscopy, *Carbon*, 2019, 149, 672-678.【2】 Y. Zhao, *et al.*, Few-layer graphdiyne doped with sp -hybridized nitrogen atoms at acetylenic sites for oxygen reduction electrocatalysis, *Nat. Chem.*, 2018, 10 (9), 924-931.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 21703105, 11774174, 11874242) .

正甲醇和仲甲醇的相互转换率

马丽莎、P. L. Chapovsky^a、孙振东*

山东大学物理学院, 济南 250100; 喀什大学物理与电气工程学院, 喀什 844006

a、Institute of Automation and Electrometry, 630090 Novosibirsk

*E-mail: zdsun@sdu.edu.cn

摘要: 甲醇 (CH₃OH) 分子因其内部具有甲基和羟基间的相对转动即扭动, 而使得甲醇分子的能级结构非常复杂, 因而一直是分子物理研究中的代表性分子。按照量子力学中的泡利不相容原理, 甲醇分子由称之为正甲醇和仲甲醇的两种核自旋变体组成。它们分别对应着甲基 (CH₃) 上三个氢原子核的自旋方向平行和其中一个与其它两个反平行, 以及分别对应着扭动对称的 A 成份和 E 成份。A—E 成份间的跃迁通常相当微弱, 至今还没观测到它们间的光谱线。然而对于气相甲醇分子, 实验上却观测到了正甲醇和仲甲醇两种核自旋变体分别向其自然的热平衡态转换的现象[1]。这里, 我们对此进行了理论研究。我们建立了正 仲甲醇核自旋变体之间相互转换的量子理论模型, 并对其进行了数值计算。

我们的量子理论模型是根据量子弛豫理论建立的[2]。研究发现正—仲甲醇之间的相互转换是由于其内部微弱的超精细相互作用和分子间的频繁碰撞。我们对正甲醇与仲甲醇之间符合选择定则 $|\Delta J| \leq 2$ 和 $|\Delta K| \leq 2$ 且能级间隔小于 2.7 GHz 的七对近简并能态进行了该超精细相互作用矩阵元的计算, 并按照下式通过对所有能级对的 α (正甲醇) 和 α' (仲甲醇) 进行求和, 得到了它们间的转换率。公式中, W_α 是正态 α 的玻尔兹曼分布因子; $W_{\alpha\alpha'}/2\pi$ 为 α 和 α' 态的能级间隔; $\Gamma_{\alpha\alpha'}$ 是压力展宽系数。

$$\gamma = \sum_{\substack{\alpha \in o \\ \alpha' \in p}} \frac{2\Gamma_{\alpha\alpha'} |V_{\alpha\alpha'}|^2}{\Gamma_{\alpha\alpha'}^2 + \omega_{\alpha\alpha'}^2} (W_\alpha + W_{\alpha'})$$

在压强为 1 Torr 和温度为 300 K 的实验条件下, 我们计算得到的甲醇分子核自旋变体之间的转换率为 $1.05 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, 它是实验值 [1] $2.1 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ 的一半。其中贡献较大的两组能级对为 $(v_t K^\pm, J) = (0\ 4^-, 24) - (0\ 2, 25)$ 和 $(3\ 1^+, 34) - (3\ 0, 35)$, 这里 v_t 是扭动量子数, K 是转动量子数 J 在 CH₃ 轴上的投影分量。

关键词: 扭动, 核自旋变体, 量子弛豫, 正 仲甲醇转换率

参考文献

[1] Z-D Sun et al., Separation and conversion dynamics of nuclear-spin isomers of gaseous methanol, Nat. Commun. 2015, 6: 6877.

[2] P. L. Chapovsky, CH₃F spin-modification conversion induced by nuclear magnetic dipole-dipole interactions, Phys. Rev. A. 1991, 43(7), 3624-3630.

基金项目: 作者感谢基金项目 (Nos. 91536105, 11174186) 和“天山学者计划”科研启动费的支持。P. L. Chapovsky 感谢项目 No. 17-12-01418 的支持。

PT symmetry of the Su-Schrieffer-Heeger model with imaginary boundary potentials and
next-nearest-neighboring coupling

李学思

东北大学理学院, 沈阳市和平区文化路3巷11号 110819

Email: 1500153@stu.neu.edu.cn

Abstract: Over the past decades, systems with non-Hermitian Hamiltonians have become an important research concern in the quantum-physics-related field. As the simplest topological model, the Su-Schrieffer-Heeger (SSH) structure certainly attracts extensive attentions, by taking the PT symmetry into account from different aspects. By introducing the next-nearest-neighboring (NNN) intersite coupling, we investigate the eigenenergies of the PT -symmetric non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model[1] with two conjugated imaginary potentials at the end sites. It is found that such a coupling does not only enable to change the eigenenergies of both the bulk states, but also modifies the properties of the topological states in a substantial way. On the one hand, with the increase of NNN coupling, the bonding band is first narrowed and then widened with the top-bottom reversal, whereas the antibonding band is widened monotonously. On the other hand, the topological state in the non-Hermitian SSH model undergoes abundant properties. It shows that the real part of its energy departs from the energy zero point, and this state can also extend into the original topologically-trivial region. Furthermore, new topological state emerges in such a region. These changes lead to the new and complicated PT-symmetry breaking. All these phenomena should be attributed to the interplay between the particle-hole symmetry breaking and PT -symmetric non-Hermitian nature. Therefore, the topological properties of the SSH model, as well as the PT -symmetry breaking, can be efficiently modulated by considering the coexistence of the PT -symmetry mechanism and NNN intersite coupling.

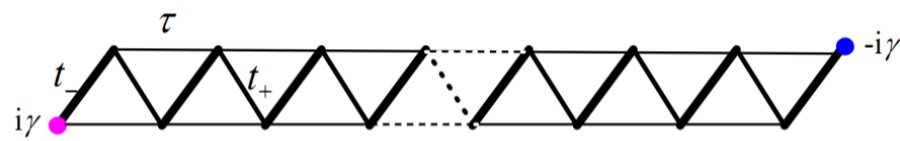


Fig.1 Schematic of the PT -symmetric non-Hermitian SSH model with NNN coupling. Two conjugated imaginary on-site potentials are introduced at its end sites to mimic the non-Hermitian terms.

关键词: PT symmetry; non-Hermitian system; SSH model

【1】 W. P. Su *et al.*, Solitons in polyacetylene, *Phys. Rev. Lett.* 1979, 42, 1698–1701.

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金资助项目 (NO. N170506007)

辽宁百千万人才项目 (NO. 2001892126)

基于分子内质子转移诱导隧穿电子波函数宇称改变设计分子开关的理论研究

王子群, 魏明志, 董密密, 胡贵超, 李宗良, 王传奎, 张广平

山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250358

Email: wangziquan@stu.sdn.edu.cn

摘要: 分子开关在纳米尺度逻辑电路中具有至关重要的作用。我们以磁性锯齿型石墨烯纳米带 (zGNR) 做电极, 以酮分子 (keto) 或醇分子 (enol) 作核心构建单分子器件, 从理论上研究了分子内质子转移对单分子器件电导的影响。互为异构体的 keto 和 enol 分子通过质子转移反应可以相互转换。计算结果表明, 相比于 keto 为核心的分子器件, 以 enol 为核心的分子器件的电导得到显著增强。这表明该分子器件的电导可以通过分子内的质子转移进行有效调控, 展现出明显的开关效应, 其开关比达到了 3.4×10^2 。此外, 当左右 zGNR 电极反平行自旋极化时, enol 分子器件自旋电流展现出极大的双极整流效应 (bipolar rectification), 自旋向上的电流具有负向整流效应, 而自旋向下的电流具有正向整流效应, 最大整流比达到 1.4×10^5 。高开关比和巨整流比源于核心分子电子波函数和 zGNR 电极电子波函数的宇称匹配与失配。当核心分子发生质子转移反应时, 分子的电子波函数宇称发生改变, 导致费米能级附近分子的电子波函数与电极电子波函数的宇称匹配情况改变, 电子的隧穿通道随之发生很大改变, 产生了显著的开关效应。我们的理论工作提出了一种设计高性能单分子开关的方法。

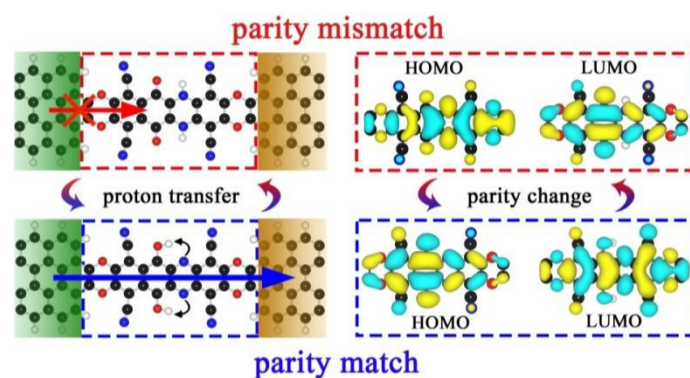


图 1 通过质子转移反应, 分子器件展现出不同的导电性能。这是由于质子转移反应改变了核心分子前线轨道的奇偶宇称, 进而改变了分子前线轨道与电极波函数的宇称匹配。

关键词: 单分子器件 分子开关 波函数的宇称 非平衡格林函数

参考文献

【1】 Weckbecker, D *et al.*, Controlling the conductance of a graphene-molecule nanojunction by proton transfer, *Nano Lett.* 2017, 17, 3341.

【2】 Wang, Zi-Qun *et al.*, High-Performance Single-Molecule Switch Designed by Changing Parity of Electronic Wave Functions via Intramolecular Proton Transfer, *J. Phys. Chem. C* 2018, 122, 17650.

资助项目: 国家自然科学基金(Nos. 11374195, 11704230)、中国博士后科学基金(No. 2017M612321)、山东省泰山学者项目。

人造规范场诱导的原子电子学光伏效应

刘伍明
(中国科学院物理研究所)

摘要: 在半导体领域中, 光电晶体管被广泛的研究。为了提高晶体管的效率, 电子元件有越做越小的趋势, 当器件的尺寸变得非常小, 电子会变得很难探测, 并且热效应很严重。与此相反, 原子在光中非常活跃, 体积比电子大得多, 因此原子在制造未来的器件中显得更有优势。最近科学家们通过制造原子气体的非平衡态来研究原子晶体管。然而, 对于光伏原子晶体管至少两个条件是必需的, 一个是外界光源和原子动量的耦合, 另一个条件是原子系统是开放系统。

我们研究了由两个中性原子阱和两个量子点组成的原子电子器件的光伏效应控制(图1)。原子阱和量子点通过量子隧穿耦合, 而两个量子点通过近共振光束产生的自旋-轨道耦合耦合。自旋-轨道耦合诱导非平凡相产生人造规范场, 使得非平凡相能够控制原子电子学器件中的净原子电流。同样的, 两个原子阱的化学势和量子点的阻塞效应(由于泡利原理)在这个装置的运行中起着原始的作用。我们写出了这个开放量子系统的哈密顿量, 并用马尔可夫近似推导出它的主方程, 从密度矩阵元的动力学出发, 对原子电子学器件中的净原子流进行了数值模拟和计算, 该结果是由自旋-轨道耦合产生的非平凡相控制两个量子点内部能级的分布造成的。该工作发表在 PRL 上 [1]。

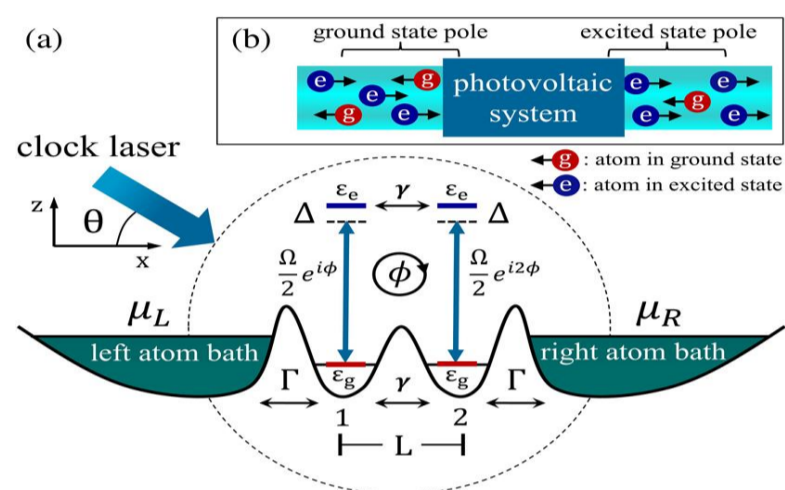


图 1. (a) 原子阱局域在原子量子点的两边, 有相同的化学势, x 轴平行于四个光势阱。一束激光作用到两个量子点上, 激光把动量传递给原子, 由于自旋-轨道耦合效应, 人造磁通出现在量子点中。(b) (a) 中光伏电池的原理图。它有基态原子“电极”和激发态原子“电极”, 箭头代表原子运动的方向。

参考文献:

- [1] W. X. Lai, Y. Q. Ma, L. Zhuang, W. M. Liu,
Photovoltaic effect of atomtronics induced by artificial gauge field,
Phys. Rev. Lett. 122, 223202 (2019).

Quantum Landauer Principle in the Information Processing of Single-Atom

闫磊磊

郑州大学, 郑州

Email: llyan@zzu.edu.cn

Abstract: One of the outstanding challenges to information processing is the eloquent suppression of energy consumption in the execution of logic operations. The Landauer principle sets an energy constraint in deletion of a classical bit of information. Although some attempts have been made to experimentally approach the fundamental limit restricted by this principle, exploring the Landauer principle in a purely quantum mechanical fashion is still an open question. Employing a trapped ultracold ion, we experimentally demonstrate a quantum version of the Landauer principle, i.e., an equality associated with the energy cost of information erasure in conjunction with the entropy change of the quantized environment. Our experimental investigation substantiates an intimate link between information thermodynamics and quantum candidate systems for information processing.

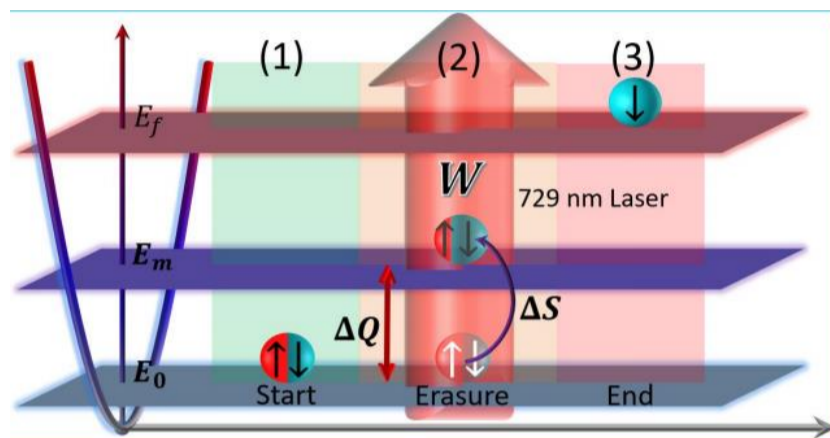


Fig1. Schematic of information erasure

关键词: Landauer Principle, Single-Atom, Information Erasure

参考文献

- [1] R. Landauer, Irreversibility and Heat Generation in the Computing Process. *IBM J. Res. Dev.* 5, 183 (1961).
- [2] R. Landauer, Dissipation and noise immunity in computation and communication. *Nature (London)* 406, 1047 (2000).
- [3] A. Berut, A. Arakelyan, A. Petrosyan, S. Ciliberto, R. Dillenschneider, and E. Lutz, Experimental verification of Landauer's principle linking information and thermodynamics. *Nature(London)* 483, 187 (2012).
- [4] J. Hong, B. Lambson, S. Dhuey, and J. Bokor, Experimental test of Landauer's principle in single-bit operations on nanomagnetic memory bits. *Sci. Adv.* 2, e1501492 (2016).
- [5] D. Reeb and M. M. Wolf, An improved Landauer principle with finite-size corrections. *New J. Phys.* 16, 103011 (2014).
- [6] L. L. Yan, T. P. Xiong, K. Rehan, F. Zhou, D. F. Liang, L. Chen, J. Q. Zhang, W. L. Yang, Z. H. Ma, and M. Feng, Single-Atom Demonstration of the Quantum Landauer Principle. *Phys. Rev. Lett.* 120, 210601 (2018).

热活化延迟荧光分子发光性能的理论研究

范建忠 蔺丽丽* 王传奎*

山东师范大学 物理与电子科学学院 山东 济南 250358

Email: fanjianzhongvip@163.com

摘要: 热活化延迟荧光(TADF)分子材料凭借起高效的激子利用率和发光效率在有机照明和有机显示等领域表现出了非常好的应用前景。同时具备聚集诱导发光(AIE)特性的发光材料能够有效地简化制作工艺并提升器件稳定性。所以,研发 AIE-TADF 特性的发光材料成为近年来人们关注的热点。本文以唐本忠院士和赵祖金教授课题组报道的 DBT-BZ-PXZ 分子为例^[1],分别通过极化连续模型(PCM)方法和量子力学与分子力学(QM/MM)结合的方法研究其液相下和固相下的发光性质,进而通过热振动关联函数(TVCF)方法研究其激发态衰减过程^[2,3],揭示 AIE 和 TADF 发光机制。研究表明,基态和第一单重激发态(S₁)之间构型变化在固相条件下明显受到抑制,这导致相应的黄昆因子和重组能都减小,无辐射能量损失路径受阻。同时,理论计算得到分子固相下瞬时荧光和延迟荧光效率分别为 14.2%和 31.2%。此外,第一三重激发态(T₁)具有杂化的局域激发和电荷转移激发特征,这使得 S₁-T₁ 之间的旋轨耦合效应增加同时能差减小,进而提升了延迟荧光效率。我们的工作从理论上阐述了 AIE 和 TADF 机制,为设计新型高性能发光分子提供了理论指导和参考^[4-6]。

关键词: 热活化延迟荧光 聚集诱导发光 QM/MM method

[1] Guo, J.; Li, X.-L.; Nie, H.; Luo, W.; Hu, R.; Qin, A.; Zhao, Z.; Su, S.-J.; Tang, B. Z., Robust Luminescent Materials with Prominent Aggregation-Induced Emission and Thermally Activated Delayed Fluorescence for High-Performance Organic Light-Emitting Diodes. *Chemistry of Materials* **2017**, *29*, 3623-3631.

[2] Peng, Q.; Fan, D.; Duan, R.; Yi, Y.; Niu, Y.; Wang, D.; Shuai, Z., Theoretical Study of Conversion and Decay Processes of Excited Triplet and Singlet States in a Thermally Activated Delayed Fluorescence Molecule. *The Journal of Physical Chemistry C* **2017**, *121*, 13448-13456.

[3] Shuai, Z.; Peng, Q., Excited States Structure and Processes: Understanding Organic Light-Emitting Diodes at the Molecular Level. *Physics Reports* **2014**, *537*, 123-156.

[5] Fan, J.; Lin, L.; Wang, C.-K., Excited State Properties of Non-Doped Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitters with Aggregation-Induced Emission: A Qm/Mm Study. *Journal of Materials Chemistry C* **2017**, *5*, 8390-8399.

[5] Fan, J.; Zhang, Y.; Zhou, Y.; Lin, L.; Wang, C.-K., Excited State Properties of a Thermally Activated Delayed Fluorescence Molecule in Solid Phase Studied by Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Method. *The Journal of Physical Chemistry C* **2018**, *122*, 2358-2366.

[6] Fan, J.; Zhang, Y.; Zhang, K.; Liu, J.; Jiang, G.; Li, F.; Lin, L.; Wang, C.-K., Towards Boosting the Exciton Lifetime and Efficiency of near-Infrared Aggregation Induced Emitters with Hybridized Local and Charge Transfer Excited States: A Multiscale Study. *Journal of Materials Chemistry C* **2019**, *7*, 8874-8887.

基金项目: 国家自然科学基金项目(NO.11904210), 博士后科学基金面上资助(NO.2018M642689), 山东师范大学青年科技培育基金。

Progresses in building a femtosecond extreme-ultraviolet (XUV) comb at WIPM

LinQiang Hua^{a,b}, Jin Zhang^{a,b}, Zhong Chen^{a,b}, Yun Jin^{a,b}, XiaoJun Liu^{a,b,#}

^a State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics, Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China

^b University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China

[#] Corresponding author: xjliu@wipm.ac.cn

Abstract: XUV comb has lead to a joint frontier of precision spectroscopy and ultrafast science since its first demonstration in 2005 [1-2]. On one hand, it provides a coherent light source in the XUV region with narrow band width for the first time. This advance pave the way for precision spectroscopic measurements in the XUV region. On the other hand, ultrafast electronic processes in atoms or molecules can be traced on the unprecedented attosecond time scale via high order harmonics generation when the laser intensity inside an enhancement cavity reaches $\sim 10^{13}$ W/cm².

In this work, we report on the recent progresses in building an XUV comb at Wuhan Institute of Physics and Mathematics (WIPM). The driving IR comb has a repetition rate of 100 MHz, a pulse duration of ~ 100 fs and a maximum output power of 100 W. After mode matching, this IR comb was coupled into a 3-meter long travel wave enhancement cavity. With Pound-Drever-Hall (PDH) method, we were able to lock the length of the enhancement cavity to the repetition rate of the driving laser for more than one hour. The average power in the enhancement cavity can be as high as 6.08 kW. After introducing Xe gases into the focus region, clear sign of plasma has been observed. The generated harmonics can be coupled out of the enhancement cavity with a Brewster plate, and detected with a grating and a sodium salicylate plate. The shortest wavelength that we can reach is 55 nm. Preliminary power measurement indicates more than 5.35 mW for the third harmonics is generated in the focus region, implying that a few tens μ W could be obtained in the XUV region. A beat note measurement of the third harmonics (one beam from the enhancement cavity and the other from the sum frequency in BBO crystal) yield a line width of a few Hz, indicating a coherent time of the order of second. Further improvement of the performance of the XUV comb setup is on the way.

[1] R. J. Jones *et al.*, Phys.Rev.Lett., **94** (2005) 193201.

[2] C. Gohle *et al.*, Nature, **436** (2005) 234.

强激光场下 NO 分子振动态分辨共振电离延迟探测

李兴、胡文惠、赵红雪、罗嗣佐*、丁大军*
吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012

摘要: 研究原子分子电离动力学是阿秒物理至关重要的目的之一, 其中原子分子电离延迟可以利用高次谐波与基频激光场共同作用的 RABBITT 方法进行测量, 该方法通过测量相位调制的振荡边带延迟得出不同电离过程中的时间延迟[1, 2], 并且该方法近几年来也拓展到测量强场共振电离及阈上电离的时间延迟中[3]。我们利用强倍频激光 (400 nm) 和弱基频光 (800 nm) 组成的激光场 ($I_{2w}/I_w \sim 100$, 50 fs) 首次研究了 NO 分子共振电离过程中的延迟, 通过结合电子速度成像实现了不同电子-振动态电离过程的测量。通过改变激光场的相对相位实现了振动态分辨的光电子能谱随激光场相位调制的测量, 实验结果如图 1 所示。首次发现不同振动态的电离通道随激光场相位改变呈现不同的相位调制, 比较它们的相对相位可以清晰地看到电离延迟和激发态振动态布居之间的关系, 不同通道的电离延迟时间可以从阿秒 (as) 变化到飞秒 (fs)。我们的实验证明 RABBITT 方法可以研究分子共振电离通道振动态分辨的光电离延迟, 并且研究结果将有助与我们探索电子态-振动态相干耦合的分子电离超快动力学。

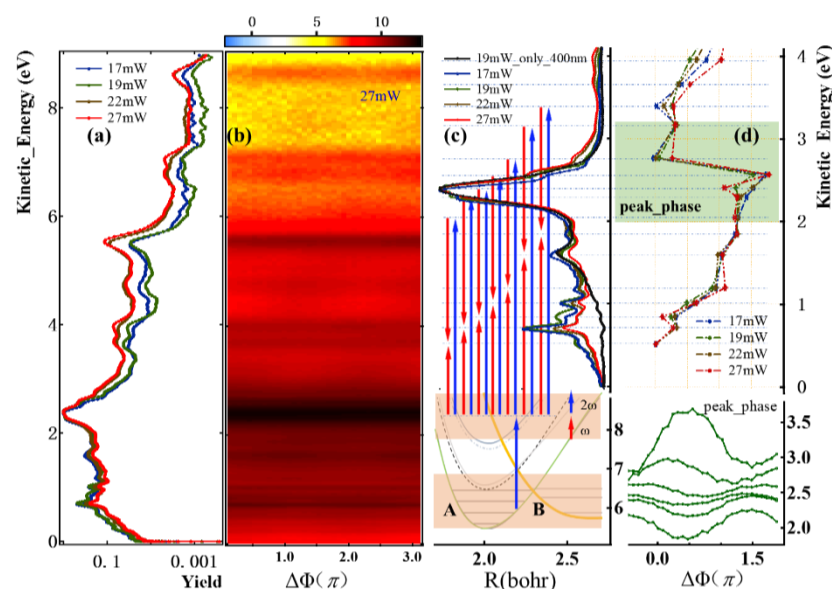


图 1 NO 分子电离电子实验结果: (a) 不同光强下的光电子能谱; (b) 光场相位调制的光电子谱; (c) 不同能量的双光子干涉通道示意图; (d) 各能量通道的相对相位及部分振动峰的位相关系图。

参考文献

- [1] Klünder K et al Phys. Rev. Lett. 106 143002 (2011)
- [2] M. Huppert, I. Jordan, D. Baykusheva, A. von Conta, H. J. Wörner, Phys. Rev. Lett. 117, 093001 (2016)
- [3] Lucas J. Zipp, Adi Natan, and Philip H. Bucksbaum, Optica 1, 361-364 (2014)

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11534004, 11704148, 11627807) 等

电子与原子分子及团簇碰撞动力学实验研究

任雪光

西安交通大学 理学院, 西安 710049

Email: renxueguang@xjtu.edu.cn

摘要: 关联的量子多体动力学过程是原子分子和光物理研究领域的热点方向之一。电子碰撞实验在研究动力学方面具有其重要性: 一方面, 从动力学完全测量层面探索量子物理中最基本的多体相互作用, 揭示物质中重要的电子结构信息; 另一方面, 电子碰撞电离过程的实验研究为理解和解决大气及环境物理、等离子体科学、核聚变、辐射治疗等过程中的物理机制和关键科学问题提供了重要依据。近年来, 我们利用多粒子符合成像谱仪(反应谱仪: Reaction Microscope, COLTRIMS)和脉冲电子束, 开展了一系列电子与原子、分子及团簇碰撞的动力学研究实验。图 1 为反应谱仪的基本原理示意图, 实验利用均匀的电场和磁场以及位置和时间灵敏的二维探测器, 符合测量反应后 4 立体角的末态离子和电子的动力学过程。利用高性能反应谱仪近期研究了电子与原子碰撞电离的三维全空间散射截面, 电子碰撞氦原子双电离过程中的量子四体强关联特性[1], 氢分子轴取向关联的量子动力学过程, 有机分子和生物分子的电离及解离机制, 电子碰撞团簇过程中的多重散射现象, 以及团簇体系中新的能量转移、电荷转移过程[2], 高能 (e , $2e$) 分子轨道成像[3]等。详细的研究进展将在本次会议中报告。

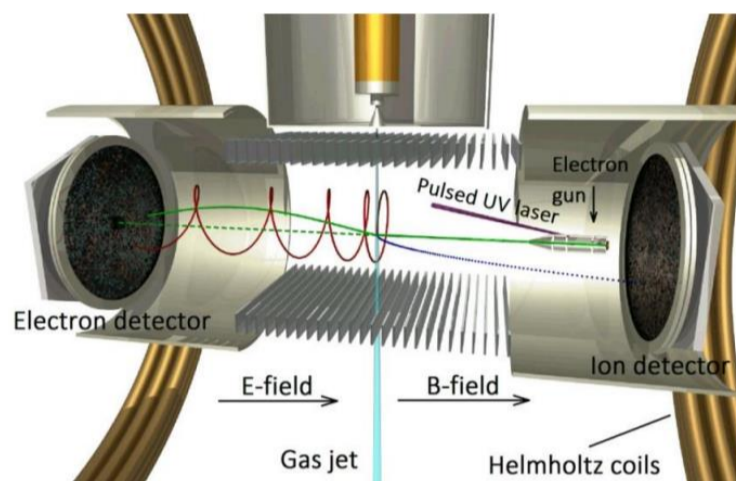


图 1 电子碰撞实验中的反应谱仪原理示意图

关键词: 电子碰撞; 原子分子; 团簇; 电离; 分子解离; 量子关联动力学。

参考文献

【1】 X. Ren et al., Phys. Rev. Lett. 101, 093201 (2008).

【2】 X. Ren et al., Nat. Commun. 7 11093 (2016).

【3】 Z. Xu et al., Phys. Rev. A 99, 062705 (2019).

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO.11774281) 等

一维和二维分子团簇中的超快激子动力学研究

王鹿霞

北京科技大学数理学院物理系, 北京 100083

Email: luxiaawang@sas.ustb.edu.cn

摘要: 激发能量转移过程对提高光电器件和有机光伏系统光吸收效率有至关重要的作用, 因此染料分子、共轭聚合物或超分子复合体中的激发能量转移问题一直是科学研究工作者关注的问题。一般来说, 分子复杂体在弱场激发作用下产生单激子态, 单激子态在各种分子复杂体内的动力学行为已有大量的研究。若分子体系受到强场激发, 或其附近有金属纳米粒子, 或其置于光学微腔中, 伴随着强场激发或等离激元或腔光子的出现在分子体系的不同分子单体上会产生多激子态, 或在同一单体上产生高阶激发态。由于分子间的相互作用, 激子态是游离于整个分子系统的非局域激子, 并可能出现激子裂变、激子融合、激子与极化声子的杂化态、介于弗伦克尔激子和莫特激子的中间激子态等复杂结构, 同时出现新的激发能量转移通道和能量耗散过程。我们应用密度矩阵理论研究了分子或分子团簇在强电场作用下多个激子同时产生后的电荷转移和能量转移过程, 得到了分子在激光脉冲作用下的非线性响应图像, 研究了分子系统中多个分子的第一激发态的动力学过程。为了避免计算相同激发数量对应不同位形的大量矩阵元, 用计算物理量的数学期望值来代替计算这个物理量对应的每个位形矩阵元的近似, 其运动方程建立在关于密度算符的量子主方程上, 并采用 Lindblad 耗散^[1]。在数学期望值近似下得到动力学方程的阶层方程组。以一维和二维的对联苯分子为例研究了其多激子的产生及相应激发能量转移的动力学过程, 对不同脉冲作用下的激发能量转移做了详细的分析和讨论。

关键词: 分子团簇, 激发能量转移, 多激子, 超快光激发

参考文献

[1] Luxia Wang, Volkhard May, Theory of multiexciton dynamics in molecular chains, Phys. Rev. B, 2016. 94(19): 195413

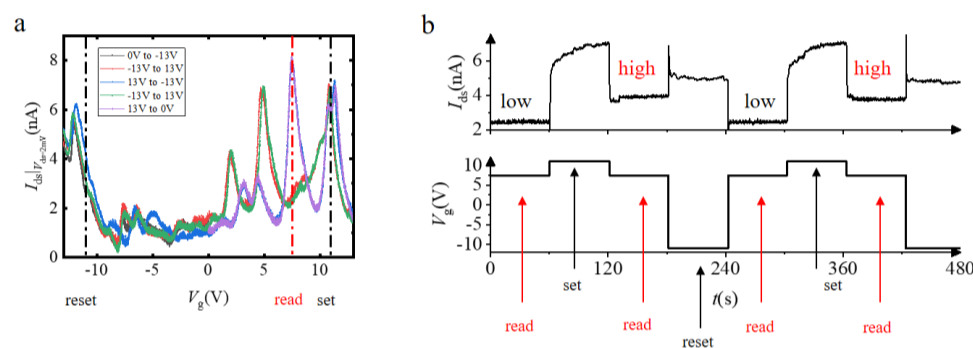
A Gd@C₈₂ Based Single Cluster Memory with Ferroelectric-Like Switching

宋凤麒

南京大学物理学院, 南京 210008

Email: : songfengqi@nju.edu.cn

Abstract: New memory devices have been central to the development of modern integrated circuits. These include resistive memory, magnetic memory, ferroelectric memory, spintronic memory, and charge-trapping memory. In most of these devices, whether volatile or non-volatile, a storage unit is simulated by an electronic state. Here we study the single cluster device of endohedral metallofullerene Gd@C₈₂ with single-electron characteristic Coulomb diamonds in the differential conductance measurement. Two sets of stability diagrams were observed and determined to be the two sets of energy levels of two trapping states of the Gd atom in the carbon cage by the quantum chemistry calculation. The device thus demonstrated a bi-steady state memory unit, showing a resistance change of up to 271% for each operation. The two states were found to exhibit different electrical dipoles, which could be switched by the back gate in a hysteresis loop-like operation with a coercive gate field of ~ 0.5 V/nm. This suggests the realization of the long desired single cluster ferroelectric devices.



Demonstrating of the single cluster memory device using the two stability diagrams. A: The source–drain current plotted against the gate voltage with the source–drain bias at 2 mV. **B:** Single molecular memory created using figure a.

关键词: Single Cluster Memory; Ferroelectric-Like Switching

基金项目: National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0303203), National Natural Science Foundation of China (Grant No. U1732273, No. 91622115, No. 11522432, No. 11674165, No. 11834006 and No. 11574217).

Deposition and visualization of Au₂₀ clusters on surfaces

李哲

哈尔滨工业大学（深圳）理学院，深圳 518055

Email: zhe.li@hit.edu.cn

Abstract: Supported gold nanoclusters are of significant interest in catalysis and optics. Among all the ligand-free Au clusters, Au₂₀ is the most remarkable one. It has been discovered in the gas phase as highly stable size with a tetrahedral structure and an exceptionally large HOMO-LUMO gap of around 1.8 eV. However, the existence and stability of the tetrahedral structure and the electronic property on surfaces so far have not been confirmed. Here, we combine cluster beam deposition and scanning tunneling microscopy techniques to explore the structural and electronic properties of size-selected Au₂₀ clusters, as well as their aggregation behavior on ultrathin NaCl films. Both our experiments and density functional theory simulations demonstrate that the predicted tetrahedral structure as well as the theoretically described closed-shell electronic configuration of Au₂₀ is retained on NaCl surfaces. We further reveal that the Smoluchowski ripening mechanism governs the layer formation of supported Au₂₀ clusters. Our work also provides a generally applicable routine to study the intrinsic properties of well-defined clusters on surfaces.

关键词: Au₂₀ cluster, supported cluster, scanning tunneling microscopy

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11704057)

快凝过冷金属熔体中二十面体与面心立方团簇的竞争与演变

蒋元祺¹ 文大东² 彭平³¹南昌师范学院物理系, 南昌 330032²湖南工程学院, 湘潭 411104³湖南大学, 长沙 410082Email: yuanqi325@163.com

摘要: 采用 MD 模拟液体金属 Ag 的快凝过程, 重点采用 DFT 研究二十面体短程序(ISRO)、FCC 短程序(FSRO)、二十面体中程序(IMRO)与 FCC 中程序(FMRO)的能态、化学稳定性及电子结构, 发现化学硬度能很好的解释快凝过程中 ISRO、FSRO、IMRO 与 FMRO 在不同温度区间各自数目的分布情况; 过渡态(TS)搜索发现, 在过冷液体中 ISRO 很难直接转变为 FSRO 不仅是因为在演化路径中存在能量势垒, 而且是因为该转变过程需要从外界吸收热量; 对能级的分析发现, 在团簇的合并与生长过程中, 通常壳层原子的电子优先参与成键, 共享原子次之, 中心原子参与形成共价键的可能性最小等; 总之快凝过程中不同温度区间化学稳定性较高的团簇, 主要是因其本身有相对较大的能隙、较低的 HOMO 能级、更小的费米能级电子数 $N(E_F)$ 以及前线轨道电子的完美满占据等多种原因共同导致。

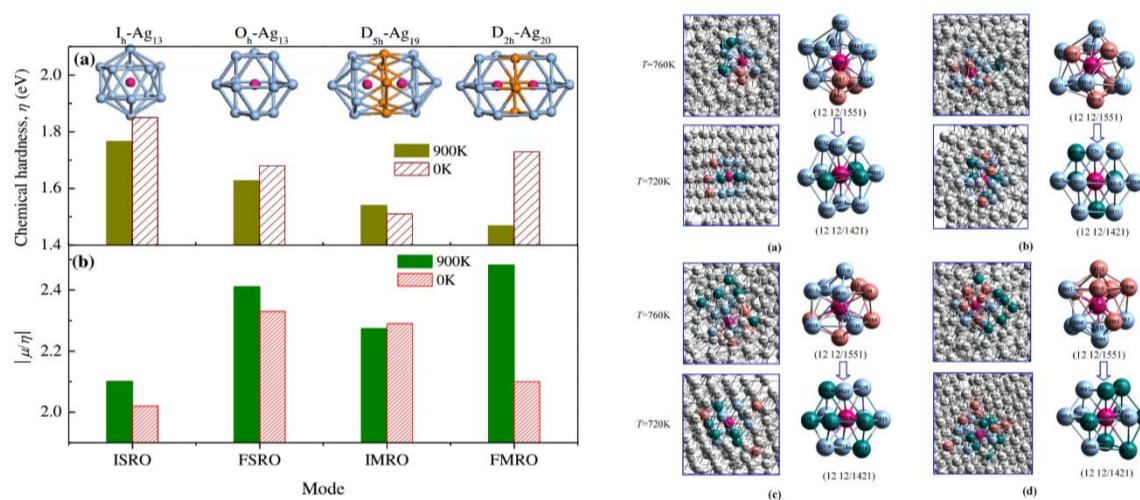


图 1 二十面体与面心立方团簇的化学硬度(左图), 及竞争与演变(右图)

关键词: 金属玻璃, 密度泛函, Cu-Zr 二十面体, 电子结构, 化学序

基金项目: 江西省青年科学基金 (批准号: 20171BAB216001)、江西省教育厅科技项目 (批准号: GJJ161242)、南昌师范学院博士启动基金 (批准号: NSBSJJ2015034) 和国家自然科学基金 (批准号: 51071065) 资助的课题。

激光产生温稠密物质的超快动力学

戴佳钰

国防科技大学物理系, 长沙 410072

Email: jydai@nudt.edu.cn

摘要: 温稠密物质的离子强耦合和电子部分简并等量子效应同样重要, 且热效应使得结构无序, 其中具有多组分、动态性的特征, 其物质的结构、热力学性质和输运性质对于天体物理、行星物理以及惯性约束聚变等具有重要科学价值。当前, 激光与物质相互作用是产生温稠密物质的主要方式之一。激光首先加热电子, 其中会发生光电离、电子热化、电子平衡、电声耦合等不太时间尺度的超快动力学过程。理论上, 首先需要描述非孤立原子的模型, 描述离子强耦合以及电子部分简并。同时, 需要发展描述电子以及离子动力学的方法, 描述其中的不同时间尺度动力学。我们利用了含时密度泛函方法描述激光作用下电子光电离, 研究其中百飞秒内的动力学过程。发展了电子有效力场方法(eFF), 利用高斯波包描述电子行为, 同时修正高斯波包在高温下的弥散行为, 建立了约束有效电子力场(CEFF)方法和计算程序, 对激光作用后电子-离子能量交换超快过程进行直接刻画。结果表明, 发展的新模型所获得的电子离子能量交换速率比传统经验模型和动理学模型的结果慢 300%, 与近期实验结果一致。此外, 利用分子动力学方法, 我们还获得了温稠密物质的电子状态方程、稠密氢的相图、电子电导率等一些列物理特性, 为惯性约束聚变参数研究提供了依据。

关键词: 温稠密物质, 激光与物质相互作用, 超快动力学, 分子动力学

参考文献

- [1] Qian Ma, Jiayu Dai, Dongdong Kang et al. Extremely Low Electron-ion Temperature Relaxation Rates in Warm Dense Hydrogen: Interplay between Quantum Electrons and Coupled Ions. *Phys. Rev. Lett.* 2019, 122: 015001
- [2] Dongdong Kang, and Jiayu Dai. Dynamic electron-ion collisions and nuclear quantum effects in quantum simulation of warm dense matter. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2018, 30: 073002 (Invited Topic Review)
- [3] Jiayu Dai, Cheng Gao, Huayang Sun, Dongdong Kang. Electronic and Optical Properties of Warm dense Lithium: Strong Coupling Effects. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2017, 50 184004. (Emerging Leaders selected)
- [4] Jiayu Dai, Dong Kang Dongdong, Zhao Zengxiu, Wu Yanqun and Yuan Jianmin. Dynamic Ionic Clusters with Flowing Electron Bubbles from Warm to Hot Dense Iron along the Hugoniot Curve. *Phys. Rev. Lett.* 2012, 109: 175701.
- [5] Jiayu Dai, Yong Hou, and Jianmin Yuan. Unified first principles description from warm dense matter to ideal ionized gas plasma: Electron-ion induced friction. *Phys. Rev. Lett.* 2010, 104, 245001.

Transition rates for a Rydberg atom surrounded by an interactive plasma environment

林成亮¹、袁建民^{1,2}

1. 中国工程物理研究院研究生院, 北京 100193

2. 国防科技大学文理学院物理系, 长沙 410073

Email: cllin@gscaep.ac.cn

Abstract: The properties of an atom immersed in dense plasmas, such as the transition rates and the optical spectra, are strongly modified by the interactive plasma environment. We derive a quantum master equation for an atom coupled to a heat bath represented by the charged particle many-body environment. In Born-Markov approximation, the influence of the plasma environment on the reduced system is described by the dynamical structure factor, which accounts for the detailed spatial and temporal correlations and fluctuations of the plasma environment. The plasma spectral line profile is derived by means of a quantum master equation approach, which coincides in the quantum mechanical region with the spectral line profile calculated via the thermodynamic Green's function technique. Additionally, transition rates for highly excited Rydberg levels are also investigated within this quantum-statistical approach. Wave packets are introduced as robust states allowing for a quasi-classical description of Rydberg electrons. In the quasi-classical region of highly excited Rydberg states, it has been shown that the circular-orbit wave packet is more reasonably to describe the localization of electrons within Rydberg states. The calculated transition rates are in a good agreement with experimental data.

【1】 C. Lin *et al.*, Transition rates for a Rydberg atom surrounded by a plasma, *Phys. Rev. A* 93, 042711 (2016)

热稠密等离子体中的屏蔽势和电离能下降

曾交龙¹、高城¹、刘鹏飞¹、李永军¹、袁建民¹²

1 国防科技大学文理学院, 长沙湖南 410073

2 中国工程物理研究院研究生院, 北京 100193

Email: jlzeng@nudt.edu.cn, jmyuan@nudt.edu.cn

摘要: 热稠密等离子体广泛存在于自然界和实验室中, 在恒星、白矮星、中子星内部和惯性约束聚变等离子体中普遍遇到, 在超强x-射线激光和光学波段激光与固体的相互作用中, 也能产生平衡或非平衡的热稠密等离子体。等离子体屏蔽势是进一步研究状态方程、辐射特性以及其它物理特性的基础, 因而具有基础的重要性。目前普遍使用解析的物理模型描述屏蔽势, 包括 Debye-Hückel¹, ion sphere², Stewart and Pyatt³, and Ecker and Kröll⁴, 难以解释仅有的几个固体密度的等离子体电离能下降的实验结果⁵⁻⁸。最早的定量实验⁵使用x-射线激光产生稠密铝等离子体, 测量的电离能下降的结果与Ecker and Kröll⁴吻合较好, 然而与广泛使用的Stewart and Pyatt³不一致, 随后使用高强度的光学激光Orion laser产生稠密的铝等离子体⁶, 然而测量结果与Stewart and Pyatt³吻合更好。这些矛盾的结果表明, 需要更自洽、更精确的理论方法来描述等离子体中的屏蔽势。我们提出一种非解析的离子球模型描述稠密等离子体的屏蔽势, 这种势是利用电子的费米-狄拉克分布和等离子体的电离平衡得到的。实际计算表明, 这一没有任何参数的物理模型能够有效描述等离子体的屏蔽, 因而是计算稠密等离子体中原子特性的有效工具, 可望在太阳内部、惯性约束聚变、高能量密度等离子体中得到应用。

关键词: 等离子体屏蔽势, 高温稠密等离子体, 电离能下降

参考文献

- 【1】 P. Debye and E. Hückel, The theory of electrolytes I. The lowering of the freezing point and related occurrences, *Phys. Z.* 24, 185–206 (1923).
- 【2】 B. F. Rozsnyai, Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density, *Phys. Rev. A.* 5, 1137 (1972).
- 【3】 J. C. Stewart and K. D. Jr. Pyatt, Lowering of ionization potentials in plasmas, *Astrophys. J.* 144, 1203–1211 (1966).
- 【4】 G. Ecker and W. Kröll, Lowering of the ionization energy for a plasma in thermodynamic equilibrium, *Phys. Fluids* 6, 62–69 (1963).
- 【5】 O. Ciricosta et al., Direct measurements of the ionization potential depression in a dense plasma, *Phys. Rev. Lett.* 109, 065002 (2012).
- 【6】 B. I. Cho et al., Resonant K α spectroscopy of solid-density aluminum plasmas, *Phys. Rev. Lett.* 109, 245003 (2012).
- 【7】 O. Ciricosta et al., Measurements of continuum lowering in solid-density plasmas created from elements and compounds. *Nat. Commun.* 7, 11713 (2016).
- 【8】 D. J. Hoarty et al., Observations of the effect of ionization-potential depression in hot dense plasma, *Phys. Rev. Lett.* 110, 265003 (2013).

基金项目: Science Challenge Project No. TZ2018005, National Key R&D Program of China under the grant No. 2017YFA0403202, 国家自然科学基金项目 (No. 11674394)。

x射线汤姆逊散射对温热稠密物质诊断的理论研究

侯永¹；袁建民^{1, 2}

1、国防科技大学文理学院物理系，湖南长沙；2、中国工程物理研究院研究生院，北京

摘要：温热稠密物质状态的精确诊断，如温度、密度、平均电离度等，对惯性约束聚变、天体物理等研究领域具有重要的意义。随着激光技术的发展，采用x射线汤姆逊散射技术已经成为实验室里诊断温稠密物质状态可靠的手段。然而，在理论上获得x射线汤姆逊散射谱，既需要合理描述温稠密物质中离子间的强耦合、电子简并、部分电离的特点，又要考虑非局域热动平衡对x射线弹性散射谱影响，以及离子周围局域势场的变化所导致自由电子的局域化和束缚电子能级移动的量子行为。本文将从建立描述温热稠密物质结构的模型出发，研究等离子体中不同价态离子的关联效应，及其对电子结构的影响，将实现电子、离子结构的自洽计算；研究离子-离子、离子-电子间的关联效应导致自由电子局域化及其对非弹性散射的影响，从理论上获得x射线汤姆逊散射谱，与实验结果比较，最终实现温热稠密物质状态的诊断。

1. Yong Hou, Richard Brebow, Jianmin Yuan, Ronald Redmer, *Phys. Rev. E*, 91(3):033114 (2015).
2. Yong Hou, Yongsheng Fu, Richard Brebow, Dongdong Kang, Ronald Redmer, and Jianmin Yuan, *High Energy Density Physics*, 2017, 22: 21-26(2017).
3. Min Lv, Zhimin Hu, Yong Hou, et al., *Phys. Plasma.*, 26: 022702 (2019).
4. Yongsheng Fu, Yong Hou, et al., *Phys. Plasma.*, 2018, 25:012701 (2018).
5. K.Wunsch, J. Vorberger, G. Gregori, and D. O. Geriche, *EPL*, 94, 25001 (2011).

弱磁领域磁场计量问题的思考

缪培贤, 杨世宇, 崔敬忠, 刘志栋
 兰州空间技术物理研究所, 兰州 730000
 Email: miaopeixian@163.com

摘要: 弱磁领域磁场计量服务实现整个国防系统磁感应强度量值溯源和量值传递, 评价弱磁领域磁强计各项技术指标, 在国防系统具有重要意义。现阶段我国由于缺乏高灵敏度、高精度的原子磁强计和有效的综合评价方法, 导致国内弱磁领域还没有本质解决磁场计量问题, 具体表现在近几年国家诸多项目渠道发布磁强计指南时出现了不合理的技术指标。本报告列举抽运-检测型非线性磁光旋转 (NMOR) 原子磁强计和 Mz 光泵磁强计测试结果, 讨论精密电流源引入的本底磁场噪声和原子磁强计测量结果的依赖关系, 重点对磁场测量范围、灵敏度、磁场采样率、交变磁场响应带宽技术指标进行分析, 给出技术指标评价的合理化建议。上述内容可供国内相关研究单位和技术人员参考, 联合业内相关单位编写行业标准。

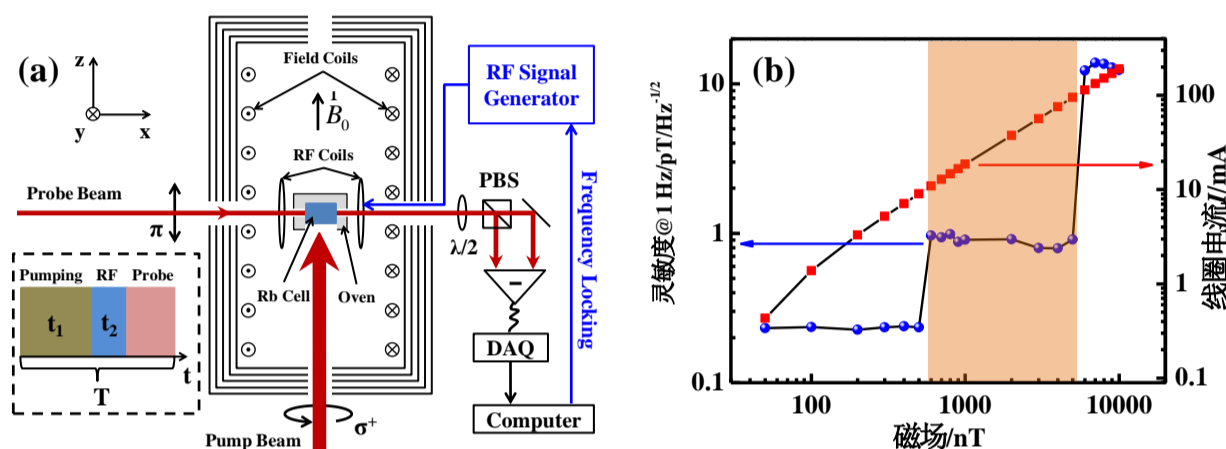


图 1 (a)NMOR 原子磁强计装置示意图;

(b)NMOR 原子磁强计灵敏度指标 (或线圈电流大小) 与外磁场的依赖关系

关键词: 原子磁强计, 测量范围, 灵敏度, 磁场采样率, 交变磁场响应带宽

参考文献:

- [1] 缪培贤, 杨世宇, 王剑祥等. 抽运-检测型非线性磁光旋转铷原子磁强计的研究[J]. 物理学报, 2017, 66(16): 160701.
- [2] 鄢建强, 崔敬忠, 缪培贤等. 原子磁强计灵敏度标定方法研究[J]. 真空与低温, 2018, 24(4): 259.
- [3] Miao P X, Zheng W Q, Yang S Y, et al. Wide-range and self-locking atomic magnetometer based on free spin precession[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2019, 36(4):819-828.

Hyperspherical coordinate-Phase space optimization (HC-PSO) method and its application in resonance of O(¹D)HBr

Ang-Yang Yu¹

1. State Key Lab Molecular & Reaction Dynamics, Beijing 100190, China

Abstract: In the present work, an efficient phase space optimization method in combination with hyperspherical coordinate, which is called Hyperspherical coordinate-Phase space optimization method (HC-PSO), has been developed to perform molecular dynamics calculations in polyatomic system. In this coordinate, the hyperspherical angle has many choices whereas the hyperspherical radius is set as the only internal coordinate. HC-PSO method can obtain the best direct product of one-dimensional (1D) phase space optimized (PSO) discrete variable representation (DVR) basis function representation in order to construct the Hamiltonian matrix. Compared with other calculations, the DVR direct-product basis function in HC-PSO is very little. Additionally, the iterative numbers needed are far less other methods and the speed of convergence in energy is very fast. In order to obtain useful scattering dynamics results, a new absorption potential is added into the potential energy along the hyperspherical radius direction. The method described above has been successfully applied into resonances of O(¹D)HBr. Some meaningful results have been gained.

Keywords

Phase space optimization (PSO); Hyperspherical coordinate; Discrete variable representation (DVR); Resonances.

Photoinduced charge transfer rate of Cy3/C₆₀ blend materialQiao Zhou^{a,b}, Cong Shen^b, Ri Ma^{a*} and Peng Song^{b*}*a Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China**b Department of Physics, Liaoning University, Shenyang 110036, P. R. China*

Abstract: The rates of charge separation and charge recombination of the cyanine dye/C₆₀ heterojunction solar cell in an external electric field were provided using the Marcus and Marcus-Levich-Jortner formalisms. The vibrational mode as another influencing factor was also introduced into the rate expression for the planar heterojunction solar cell. Detailed theoretical analysis of the excited-state of the Cy3/C₆₀ blend was achieved using density functional theory and time-dependent density functional theory. The Gibbs free energy was regulated by an external electric field, while the reorganisation energy presented the opposite conclusion. Frequency analysis was utilised to demonstrate the energy stability of the obtained structures. The rate calculated using the Marcus formalism was greater than that obtained by the Marcus-Levich-Jortner formalism. Consideration of the calculated rates in all vibration modes and at different external electric field strengths indicated that vibrational mode and external electric field played important roles in determining the rates of charge separate and charge recombination, which could provide a more accurate theoretical rate for organic photovoltaic devices.

Keywords: External Electric Field, Charge Separation, Charge Recombination, Vibrational Mode

通过官能团取代有规律地调控 3-羟基铬酮衍生物的激发态分子内质子转移特性

孙朝范, 苏醒, 周悄, 石英*

吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012

Email: shi_ying@jlu.edu.cn

摘要: 本工作利用密度泛函理论和含时密度泛函理论系统地研究了一系列 3-羟基铬酮衍生物(BFHC, BTHC, BSeHC, BDFHC, BDTHC 和 BDSeHC) 的激发态分子内质子转移 (ESIPT) 行为和光物理性质。通过氢键参数和红外振动分析, 证实了所研究分子的分子内氢键在 S_1 态均增强, 这有助于 ESIPT 反应的发生。此外, 不同的取代基会诱导分子在烯醇和酮式结构下荧光光谱多通道信号的变化 (比如波长和强度)。扫描的势能曲线显示, 分子在 S_1 态时的能垒遵循 BFHC < BTHC < BSeHC 和 BDFHC < BDTHC < BDSeHC 的顺序。结合分子键临界点的拓扑分析, 可以看出 BFHC 和 BTHC 将发生超快的 ESIPT 过程, 而其他分子则表现出较慢的 ESIPT 过程。综合分析, 原子吸电子能力的减弱和取代基的延长都会抑制分子的 ESIPT 反应, 进而影响分子的光物理性质。这些新发现可以为扩展羟基铬酮衍生物在基于 ESIPT 性质的光学器件方面的应用提供理论指导。

关键词: 3-羟基铬酮 激发态分子内质子转移 取代基 密度泛函理论

参考文献

- 【1】 Zhao, G. J.; Han, K. L.*, Hydrogen Bonding in the Electronic Excited State. *Acc. Chem. Res.* **2012**, *45* (3), 404.
- 【2】 Sun, C.; Su, X.; Zhou, Q.; Shi, Y.*, Regular tuning of the ESIPT reaction of 3-hydroxychromone-based derivatives by substitution of functional groups. *Org. Chem. Front.* **2019**. DOI: 10.1039/C9QO00722A.
- 【3】 Sun, C.; Zhao, H.; Liu, X.; Yin, H.; Shi, Y.*, Tunable ESIPT reaction and antioxidant activities of 3-hydroxyflavone and its derivatives by altering atomic electronegativity. *Org. Chem. Front.* **2018**, *5* (23), 3435.

基金项目: 国家自然科学基金 (11874180)

异丙苯的共振多光子电离和质量分辨阈值电离光谱

段春泱、郝佳钰、李昌勇、贾锁堂

量子光学与光量子器件国家重点实验室, 山西大学激光光谱研究所, 山西 030006

极端光学协同创新中心, 山西大学, 太原, 山西 030006

Email: 583352117@qq.com

摘要: 气相烷基苯分子在医疗、生物、化学等领域起着非常重要作用。苯分子的一个氢原子被异丙基取代形成异丙苯, 常用于有机合成, 或者作为溶剂。许多小组对异丙苯基态和激发态的结构和能量进行了理论和实验研究¹⁻³。Seeman 等人报道了异丙苯第一电子激发态约 200 cm^{-1} 范围的共振双光子电离谱, 确定了超声分子束中只存在一种异构物³。就我们所知, 离子基态的特性还未见详细研究报道。质量分辨阈值电离 (MATI) 光谱技术是目前测量离子光谱特性的最高分辨光谱技术之一⁴。我们采用单色共振增强双光子电离和质量分辨阈值电离技术获得了异丙苯的激发态和离子态的振动光谱, 详细研究了激发态和离子态振动特性, 首次精确确定异丙苯的绝热电离能为 $70412 \pm 5 \text{cm}^{-1}$ 。采用量子化学方法进行了理论计算, 对激发态和离子基态采用密度泛函理论 (DFT) 中的 B3PW91, 激发态采用 TD-B3LYP 方法计算了中性物基态、激发态和离子基态的能量、振动频率和几何结构。根据计算结果和结构类似分子的振动特性对实验观察到的异丙苯激发态和离子态的振动光谱进行了振动模式指认。这些研究结果为异丙苯的进一步研究提供了有价值参考数据。

关键词: 异丙苯, 共振双光子电离, 质量分辨阈值电离, 离子基态, 电离能, 振动频率

参考文献

- 【1】 J. B. Hopkins *et al.*, Vibrational relaxation in jet - cooled alkyl benzenes. I. Absorption spectra, *J. Chem. Phys.* 1980, 72, 5039
- 【2】 A. I. Fishmana *et al.*, Vibrational spectra and structure of isopropylbenzene, *Spectrochimica Acta. Part A* 2018, 71, 1128-1133
- 【3】 Jeffrey I. Seeman *et al.*, A Study of Nonrigid Aromatic Molecules. Observation and Spectroscopic Analysis of the Stable Conformations of Various Alkylbenzenes by Supersonic Molecular Jet Laser Spectroscopy, *J. Am. Chem. Soc.* 1989, 111, 3140-3150
- 【4】 Yan Zhao *et al.*, Rotamers of p-isopropylphenol studied by hole-burning resonantly enhanced multiphoton ionization and mass analyzed threshold ionization spectroscopy, *Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc* 2019, 207, 328-336

资助项目: 国家自然科学基金 (61575115, 61378039, 61835007)

利用锥形纳米光纤在铯蒸气中实现电磁诱导透明

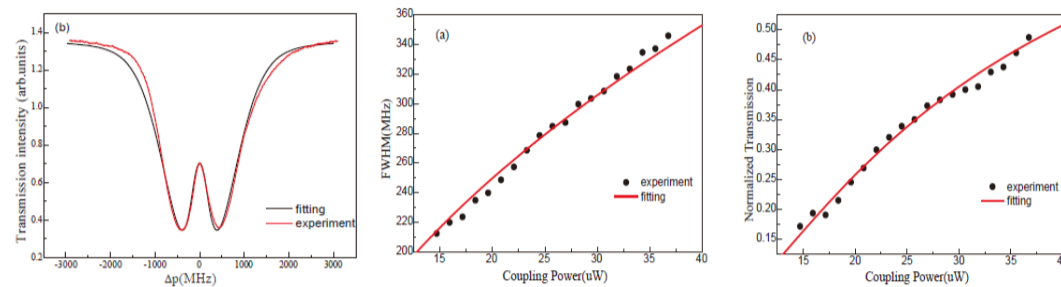
刘瑞娟¹、苏殿强¹、宋子旋¹、姬中华^{1,2}、赵延霆^{1,2*}

¹量子光学与量子光学器件国家重点实验室, 山西大学激光光谱学研究所,
山西太原 030006

²极端光学协同创新中心, 山西大学, 山西太原 030006

Email: zhaoyt@sxu.edu.cn (赵延霆)

摘要: 锥形纳米光纤(TOF)是一种有效控制光与原子耦合的特殊工具。本文利用基于 TOF 的热铯蒸气系统研究了超低功率下的阶梯型电磁诱导透明 (EIT) 现象。研究了不同耦合激光强度下 EIT 信号的线宽和透射特性。通过求解稳态密度矩阵方程, 获得的数值模拟曲线与实验结果吻合较好。本论文研究结果对进一步研究低功率水平下的非线性光学效应有重要意义。



关键词: 锥形纳米光纤、电磁诱导透明、密度矩阵方程

资助项目: 国家重点研发项目(2017YFA0304203)、国家自然科学基金(61675120, 11434007, 61875110)、国家自然科学基金优秀科研队伍项目(61121064), 山西省“1331项目”重点学科建设, 长江学者和创新团队发展计划(IRT-17R70)、111项目(D18001)

【1】 Garcia-Fernandez R, Alt W, Bruse F, Dan C, Karapetyan K, Rehband O, Stiebeiner A, Wiedemann U, Meschede D and Rauschenbeutel A 2011 Appl. Phys. B 105 3

【2】 Harris S E, Field J E and Imamoglu A 1990 Phys. Rev. Lett. 64 1107

【3】 Gouraud B, Maxein D, Nicolas A, Morin O and Laurat J 2015 Phys. Rev. Lett. 114 180503

【4】 Sayrin C, Clausen C, Albrecht B, Schneeweiss P and A Rauschenbeutel 2015 Optica 2 353

【5】 Jones D E, Franson J D and Pittman T B 2015 Phys. Rev. A 92 043806

【6】 Yang X H, Sheng J T and Xiao M 2011 Phys. Rev. A 84 043837

【7】 Gea-Banacloche J, Li Y Q, Jin S Z and Xiao M 1995 Phys. Rev. A 51 576

【8】 Ye C Y and Zibrov A S 2002 Phys. Rev. A 65 023806

空间约束下样品温度对激光诱导铝等离子体羽动力学的影响

徐万鹏, 陈安民*, 王秋云, 张丹, 李苏宇, 姜远飞, 金明星*

吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林 130012

Email: xuwp18@mails.jlu.edu.cn

摘要: 我们使用 Nd: YAG 激光烧蚀铝靶并产生等离子体, 通过加热平台来加热铝靶并使用两个平行板限制等离子体。通过测量发射光谱, 我们发现与只使用空间约束或只增加样品温度的情况下相比, 两者组合对光谱强度的增强效果更加明显。同时, 通过 ICCD 相机研究了增加样品温度和空间约束对等离子体羽动力学的影响。我们发现, 通过在等离子体膨胀过程中捕获的等离子体羽图像, 能够更容易理解等离子体发射的增强机制。当样品温度升高时, 等离子体羽流膨胀速度变快, 其宽度变得更窄。此外, 我们发现

在空间约束下升高样品温度时, 与没有空间约束相比, 反射的冲击波限制了等离子体羽流在横向上的膨胀, 从而导致等离子体在横向上进一步压缩, 以及在轴向方向上进一步膨胀。

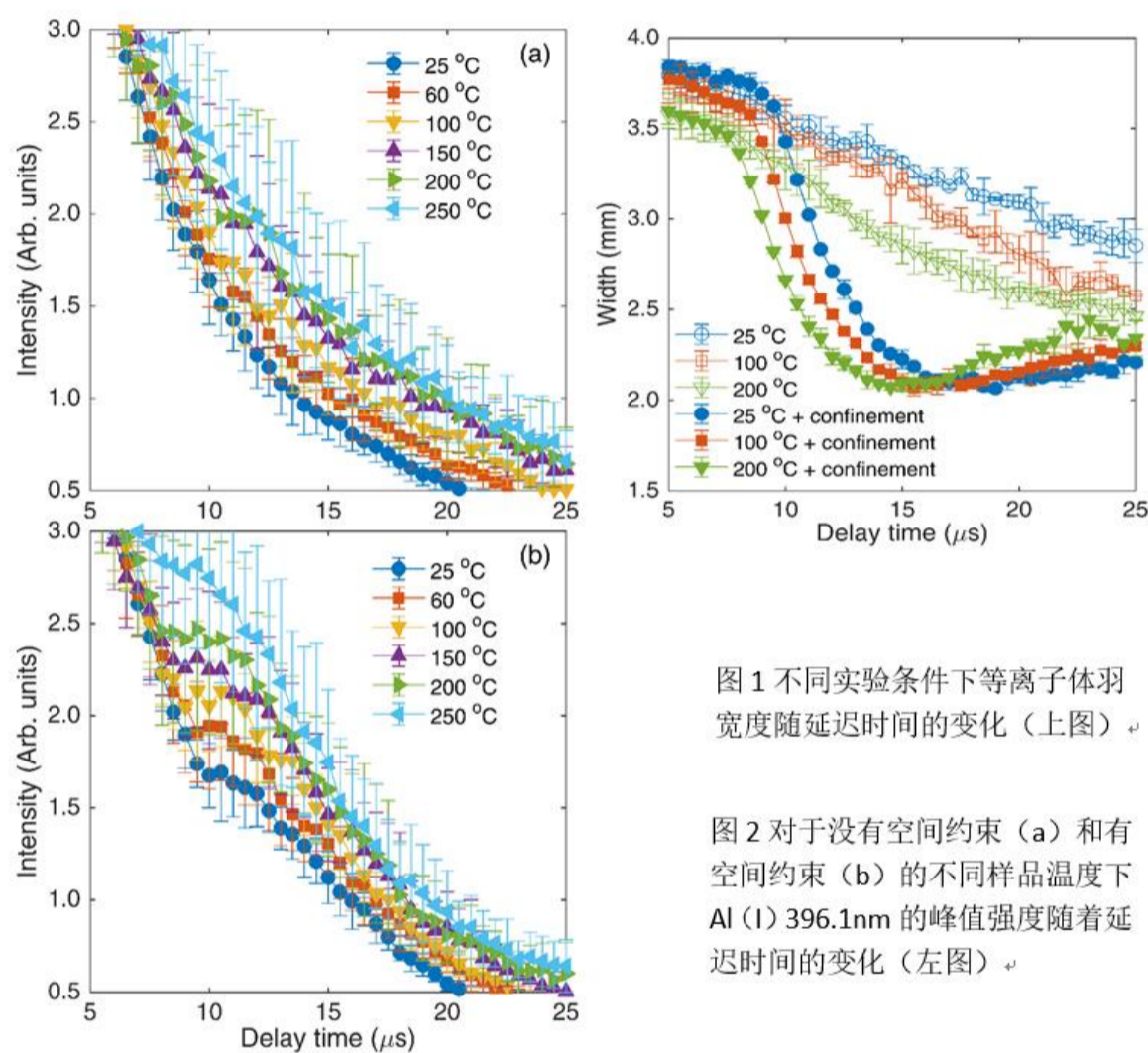


图 1 不同实验条件下等离子体羽宽度随延迟时间的变化 (上图) ↵

图 2 对于没有空间约束 (a) 和有空间约束 (b) 的不同样品温度下 Al (I) 396.1nm 的峰值强度随着延迟时间的变化 (左图) ↵

H₂ generation from H₂O dissociation using small Pt₆M (M = C, Si, Ge) clusters as catalysts and CO oxidation by the hydrolyzed products

Wen-Li Xie, Zhen-Dong Sun*

School of Physics, Shandong University, Jinan, China, 250100; School of Physics and Electrical Engineering, Kashi University, Kashgar, China, 844006

*Email: zdsun@sdu.edu.cn

Abstract: Pure platinum (Pt) clusters have been widely studied to catalyze dissociation of water (H₂O) for generation hydrogen (H₂) due to enhancing utilization efficiencies of atoms via increasing the surface-active sites [1, 2]. Density functional theory (DFT) study on a Pt₆ cluster has shown the on-top site is the most active site for adsorption of H₂ [1]. In contrast, DFT study of H₂O dissociative adsorptions on small clusters at the sub-nano scale of intermetallic compounds of Pt₆ with rich elements on earth of C, Si, and Ge for generation of H₂ has not yet carried out. The possibility for recycling usages of the hydrolyzed products O+Pt₆M (M = C, Si, Ge) for oxidation the toxic CO gas has not reported neither. In this study, we performed the first-principles calculations based on the DFT by using Pt₆M nano-clusters as catalysts, and the useful results to these interesting questions have been found.

The structures of Pt₆M are optimized and the stable one has been obtained, analyzed, and the active sites of it have been tested. The initial adsorption structures of the compound of H₂O and Pt₆M cluster (referred as H₂O@Pt₆M) are taken as reactants and are constructed by placing the H₂O molecule at the on-top, the bridge, and the hollow site of Pt₆M cluster, while the initial structures of the products are built based on the optimized structures of Pt₆M. Several stable structures of reactants of H₂O@Pt₆M are obtained. The cluster structural evolution from the reactants to products via the transition states have been investigated by the intrinsic reaction coordinate (IRC) method. Two types of reaction pathways have been found H₂O + Pt₆M' → H₂@O + Pt₆M' (M' = C and Ge) and H₂O + Pt₆Si → OH + H@Pt₆Si. The static points of all structures of the reactants, compounds in transition states, and products are confirmed by frequency analyses. When the H₂ molecule leaves the cluster, the adsorption of CO on the hydrolyzed product of O+Pt₆M in the ground state was studied. We found that the CO gas can be oxidized to form CO₂ gas in the reaction pathway of CO@(O+Pt₆M) → CO₂@Pt₆M (M = C, Si, Ge). We also found that the adsorption energy of CO₂ molecule on Pt₆M clusters is between -0.45 and -0.71 eV. In comparing with our previous results [2], these values indicate that the CO₂ molecule can release at higher temperatures than the room temperature of 293 K.

Key words: Pt₆M (M=C, Si, Ge), H₂O dissociation, H₂ generation, CO oxidation, Reuse of the hydrolyzed products

References

[1] L. Chen *et al.*, Density functional study of sequential H₂ dissociative chemisorption on a Pt₆ cluster, *J. Phys. Chem. C* 2017, 111, 5514-5519.

[2] W.-L. Xie *et al.*, Hydrogen generation from water molecule with Pt₇ clusters. *Int. J. Hydrogen. Energ.* 2017, 42(7), 4032-4039.

基金项目: NSFC (Nos. 11174186, 91536105), and Taishan Scholarship Program

强激光场下 N_2^+ 转动能级的布居操控

张宇璇、陈晓、吴玉兰、孙少华、刘作业*

兰州大学核科学与技术学院, 兰州 73000

Email: zyl@lzu.edu.cn

摘要: 飞秒激光脉冲在气体介质中传输时可以产生等离子体通道并伴随有荧光辐射, 即飞秒光丝。近年来, 随着氮气等离子体光丝中的无腔辐射现象和产生机制的研究深入, 对受激 N_2 分子形成的机制以及振动态间的布居分布成为了又一难题。在我们的研究中, 800 nm 泵浦和 400 nm 探测光与低压纯氮气作用, 利用高分辨谱仪时间分辨测量对应跃迁 N_2^+ ($B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$) 的激光信号。通过分析 391 nm 的高分辨激光光谱可以发现 N_2^+ 的能级结构、振动及振动布居等信息。实验改变氮气气压, 在气压较高时 (>60 mbar), 激光光谱中各转动峰出现明显的吸收和展宽, 这是由于等离子体对于特定波段的吸收以及光谱展宽导致的。随着气压的变化, R 支光谱中不同 J 值所占比例随着气压变化而变化, 在气压为 10 mbar 左右高 J 成分所占比例达到最大。这表明气压会对 N_2^+ 各转动能级布居分布产生影响, 我们认为这是由于气压改变导致了泵浦光功率密度的变化。利用 1/4 波片改变泵浦光的偏振, 整个激光光谱的强度会发生变化, 且当泵浦光的椭圆率降低时, R 支光谱中的高 J 成分会逐渐出现, 其在整个 R 支中所占的比例也会增强。

关键词: 激光效应, 氮分子离子, 等离子体光丝, 靶气压

参考文献

- 【1】 Zhaoxiang Liu *et al.*, Near-Resonant Raman Amplification in the Rotational Quantum Wave Packets of Nitrogen Molecular Ions Generated by Strong Field Ionization, *Phys. Rev. Lett.* 2018, 120(8), 083205.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. U1932133)。

利用核自旋共磁力仪测量自旋-重力耦合

张少博、丰羽焜、蔡波、郝传鹏、卢征天、盛东
中国科学技术大学, 合肥 230026
Email: zshaobo@mail.ustc.edu.cn

摘要: 在超出标准模型的物理理论中, 标量场或赝标量场之间可以通过一个自旋为 0 玻色子作为传播子发生相互作用, 又被称为单极偶极相互作用。这种相互作用的存在违背了 P-、T-、CP-对称性, 并且预示了新的玻色子的存在。我们使用极化的 Xe 原子作为探针, 将地球作为另外的赝标量场, 通过测量 Xe 原子的能量随核自旋方向在空间中变化来探测单极偶极相互作用的强度。此外, 未被极化的惯性质量与引力质量的等效性原理已经在实验上在很高精度上被验证, 但是, 引力的微观性质很少被研究。极化后的惯性质量可能会通过内禀自旋与引力的耦合从而违背等效性原理, 通过这种结构的实验同时可以对等效性原理与自旋方向的耦合进行检测。

在我们的实验中, 我们在同时充有¹²⁹Xe (I=1/2)和¹³¹Xe (I=3/2)同位素的原子泡中, 使用超极化(Hyperpolarized Optical Pumped)方法极化同位素的核自旋, 然后测量两种同位素核自旋进动频率, 寻找进动频率随进动轴与地球相对角度改变时的微小变化。此外, 我们开发了利用 Herriot 腔有效的增大探测光光程的技术来增加信噪比。最终预计将测量进动频率变化的上限提高至 10 nHz。

关键词: 自旋-重力耦合 检验标准模型 广义相对论 多反射腔 核自旋共磁力仪
参考文献

【1】 J. E. Moody and F. Wilczek, Phys. Rev. D 30, 130 (1984).

【2】 B. J. Venema, P. K. Majumder, S. K. Lamoreaux, B. R. Heckel, and E. N. Fortson, Phys.Rev. Lett. 68, 135 (1992).

利用 Rb-¹²⁹Xe-¹³¹Xe 共磁力仪寻找单极-偶极相互作用

丰宇焜、张少博、卢征天、盛东
中国科学技术大学, 合肥 230000
Email: fyk@mail.ustc.edu.cn

摘要: 在寻找标准模型之外新物理的实验中, 一个重要的研究对象是寻找单极-偶极耦合作用, 或者也称作自旋-质量耦合。

这一耦合中有一个重要的作用长度尺度, 就是“轴子窗口”, 在这个尺度上轴子可以作为这种相互作用的传播子。轴子的提出是为了解释量子色动力学的 CP 守恒问题, 但是它目前还没有被实验观测到。共磁力仪是将两种处于气态的原子放在同一个原子池中, 来同时同地的测量磁场。实验上先探测两种原子在外磁场下的拉莫进动频率, 再将两者作比。由于两种原子处在同一个原子池中, 又因为气态原子分布均匀, 所以可以认为它们感受到的外磁场相同。于是通过测量频率的比值, 我们一方面可以消除外磁场波动引入的误差, 另一方面也可以根据频率比值的变化提取我们想要的信息。

实验中测量得到的是 ¹²⁹Xe 和 ¹³¹Xe 核自旋的进动频率。相比电子自旋, 核自旋受外界干扰的影响更小, 相干时间也更长, 有较好的灵敏度和稳定性。实验中, 我们先用光泵浦极化铷原子, 铷原子再通过自旋交换碰撞将它的极化传递给氙原子的核自旋, 然后我们用一个 RF 脉冲翻转氙原子的极化方向, 并令其在外磁场中进动。同时, 铷原子也作为原子磁力仪系统的探测器, 直接探测氙原子核自旋的拉莫进动信号。在系统的测试中, 我们已经达到了 $2\pi \times 0.7 \mu\text{Hz}/\sqrt{h}$ 的测量灵敏度。

我们同时也研究了共磁力仪中的一项重要系统误差来源: 费米接触碰撞引起的频率偏移。通过实验探究了 ¹²⁹Xe 和 ¹³¹Xe 分别与铷原子费米接触碰撞系数的比例随温度、气压、光强变化的趋势, 并给出了理论猜想。

关键词: 共磁力仪 单极-偶极耦合 费米接触碰撞

参考文献 (中文小五号宋体, 其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字)

【1】 Bulatowicz, M., Griffith, R., Larsen, M., Mirijanian, J., Fu, C. B., Smith, E., & Walker, T. G. (2013). Laboratory Search for a Long-Range T-Odd, P-Odd Interaction from Axionlike Particles Using Dual-Species Nuclear Magnetic Resonance with Polarized Xe 129 and Xe 131 Gas. *Physical review letters*, 111(10), 102001.

【2】 Schaefer, S. R., Cates, G. D., Chien, T. R., Gonatas, D., Happer, W., & Walker, T. G. (1989). Frequency shifts of the magnetic-resonance spectrum of mixtures of nuclear spin-polarized noble gases and vapors of spin-polarized alkali-metal atoms. *Physical Review A*, 39(11), 5613.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. [11774329](#))

Stimulated Raman Scattering of Solids Driven by Femtosecond Lasers

陈忠、华林强、柳晓军[†]

中国科学院武汉物理与数学研究所, 武汉 430071

Email: xjliu@wipm.ac.cn

Abstract: When a strong femtosecond pulsed laser interacts with a transparent solid medium, the polarization of the medium is modulated by the intensity of the light, resulting in effects like femtosecond laser filament formation [1], supercontinuum [2], stimulated Raman Scattering, in which stimulated Raman scattering is an efficient third-order nonlinear frequency conversion method especially after the development of CARS Technology, it has important applications in frequency conversion and compression pulse width.

Our team adopted 800nm mid-infrared femtosecond laser and chose LiNbO₃ as the Raman medium. The anti-Stokes Raman sidebands of 20th order were achieved by CARS technology in it, and the Raman frequency shift amounts are 232 cm⁻¹, 468 cm⁻¹ and 633 cm⁻¹ which stimulates by different angles of pump light. In this case, these three kinds of frequency shifts can correspond to several Raman modes of LiNbO₃ [3]. More deeply, the vibration modes of LiNbO₃ molecules can be selected from the angle of the pump light. We are considering this problem at the level of molecular structure in order to have a clearer understanding of the physical process of stimulated Raman scattering. And after that, we may be able to extend the frequency range of the comb laser by CARS to achieve more valuable frequency measurements.

[1] A. Couairon *et al.*, Femtosecond filamentation in transparent media. *Phys. Rep.* 2008, 441 (2-4), 47-189.

[2] S. A. Frolov, *et al.*, Multi-octave supercontinuum generation with IR radiation filamentation in transparent solid-state media. *Appl. Phys. B* 2016, 122 (5), 124.

[3] Y. Repelin, *et al.*, "Raman Spectroscopy of Lithium Niobate and Lithium Tantalate. Force Field Calculations." *J. Phys. Chem. Solids.* 1999, 60 (6), 819-825.

汞原子光晶格钟研究进展

张晔^{1,2}、刘琪鑫^{1,2}、孙剑芳¹、徐震^{1,2,3}

1. 中国科学院上海光学精密机械研究所量子光学重点实验室,上海, 201800;

2. 中国科学院大学, 上海, 北京, 100049;

3. 中国科学院冷原子物理中心, 上海, 201800。

Email: xuzhen@siom.ac.cn

摘要: 近几年中性原子光晶格钟发展迅速, 无论其稳定度还是精确度都已经超过了微波喷泉原子钟。由于汞原子的黑体辐射频移较小, 在室温时其黑体辐射频移的不确定度即可达到 E-18 量级, 故汞原子是光晶格钟的热门候选元素之一。汞原子光晶格中的冷却光波长为 253.7 nm, 钟频探测光为 265.6 nm, 魔术波长晶格光为 362.5 nm, 均处于紫外波段难以直接获得。

2018 年, 本课题组利用自制的 265.6nm 超稳激光探测了冷原子中的 ¹⁹⁹Hg 原子的钟频跃迁光谱。钟频探测光为一套 265.6 nm 赫兹量级线宽的紫外激光系统, 由一个商用 1062.5 nm 窄线宽光纤激光器、超稳腔、光纤放大器和两级倍频器组成, 用于探测汞原子 ¹S₀ ↔ ³P₀ 的钟频跃迁。最终得到了 10.6 mW 亚赫兹量级的 265.6 nm 超稳激光。采用这套激光系统, 并使用无外场探测技术, 消除了冷却光的 Stark 频移, 在磁光阱中探测到了 ¹⁹⁹Hg 原子的 ¹S₀ ↔ ³P₀ 的钟频跃迁光谱, 其光谱对比度最大达 95%, 谱线宽度最小为 450 kHz, 对应的冷原子温度为 60 μK。使用无外场探测的钟频光谱, 并通过飞秒光梳测量超稳激光频率, 确定了 ¹S₀ ↔ ³P₀ 钟频跃迁的绝对频率为 1128575290.819 (14) MHz。利用五天测量的钟频光谱, 评估超稳腔的漂移率为 4.2 kHz/day。

为了下一步实现汞原子光晶格钟, 课题组正在研制基于钛宝石注入锁定技术的魔术波长光晶格激光, 开发可连续使用的冷却激光系统和可实现汞原子光晶格钟的物理系统。光晶格激光系统由一个自制 ECDL、钛宝石腔和一个倍频器产生。自制 ECDL 的波长为 725 nm, 输出功率 50 mW, 注入到钛宝石蝶形腔中, 在 6.5 W 的 532 nm 激光泵浦下, 已经得到了 1.3 W 的 725 nm 的激光。下一步将进行其倍频得到 362.5 nm 的魔术波长光晶格激光。新的冷却激光系统将采用室温 1014.8nm 光纤激光放大, 单通 PPLN 晶体倍频和 BBO 晶体腔倍频来实现。新的物理系统主体由无磁的钛合金材料构成, 将要实现 2D-MOT 和 3D-MOT 的装载, 并实现光晶格的装载, 从而最终实现在汞原子光晶格钟。目前, 真空系统已经完成, 3D-MOT 腔部分的真空度为 2*10⁻¹⁰ Torr。

关键词: 汞原子, 光晶格钟, 超稳激光, 精密测量

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11874371)

多周期对称激光场下氢分子电子局域化亚周期调控

于嘉琪、李铭轩、李孝开、罗嗣佐、丁大军
 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012
 Email: luosz@jlu.edu.cn, dajund@jlu.edu.cn

摘要: 分子在超短激光场中的电子局域化现象受到了科研工作者的广泛关注。M.Kling 等人利用 CEP 激光首次研究了 D_2 分子解离过程中的电子局域化[1], 结果表明超短激光作用下氢分子的电子局域化过程可以被认为是 $1s\sigma_g$ 和 $2p\sigma_u$ 的解离波包的相干叠加, 导致电子波包局域在其中一个解离的原子附近。我们利用中心波长为 800nm, 脉宽为 35fs 的线性偏振激光, 结合冷靶反冲离子动量谱仪 Coltrims 装置, 测量了氢分子在强激光场作用下的离子电子关联能谱, 如图 1 (b) 所示。可以清晰的看出离子能量为 0~0.5eV 的键软化通道和 0.5~2.0eV 的阈上解离通道都有着清晰的电子 ATI 峰, 分别提取这两个解离通道的电子能谱如图 1 (c) 所示, 发现电子能谱曲线基本一致, 这表明键软化和阈上解离这两个不同的解离通道有着相同的电离过程。图 1 (a) 为 H_2 解离过程中亚周期的电子局域化过程示意图, t_0 为电离时刻, 在 t_c 和 $t_{c'}$ 时, 核运动到两态耦合点, 电子波包局域在激光场的正向或负向。通过离子-电子符合测量我们研究了 H_2 在多周期对称激光场作用下的电子局域化过程, 进一步分析表明该局域化过程和分子的亚周期电离存在直接关系, 表明分子中电子局域化可以通过控制电离过程来实现调控。

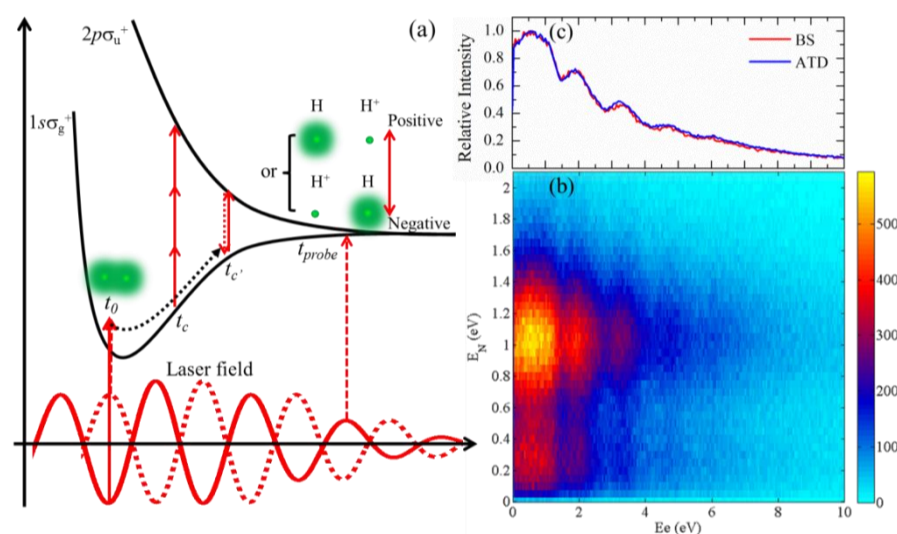


图 1 分子解离过程中电子局域化的亚周期动力学。(a):单电离势能曲线和超快动力学过程。(b):离子电子关联能谱。(c):分别与键软化和阈上解离产生质子所符合的电子能谱。

关键词: 电子局域化 键软化 阈上解离

参考文献

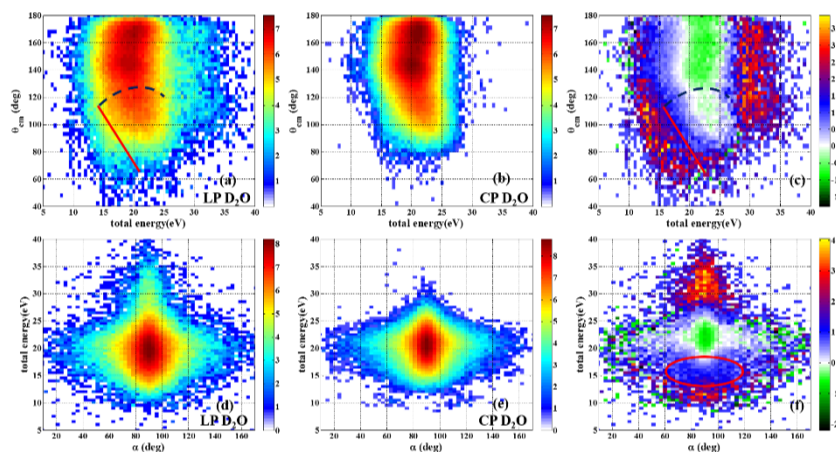
【1】 M. F. Kling *et al.*, Control of Electron Localization in Molecular Dissociation, *Science*. 2016, 312 (5771), 246.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11534004, 11704148, 11627807)。

超快振动依赖的水分子库仑爆炸成像研究

王珍珍, 王成业, 罗嗣佐, 王春成*, 丁大军*
 吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林长春 130012
 Email: ccwang@jlu.edu.cn

摘要: 水分子在强激光场中的电离过程伴随着氢原子的超快振动, 此超快振动导致分子离子发生复杂的超快结构变化, 而主要的瞬态分子成像方法, 如常规库仑爆炸成像等, 难以准确考量这一超快振动依赖的结构效应。我们通过细致分析偏振依赖的库仑爆炸动力学行为, 发现库仑爆炸能量释放可能依赖水分子不同的振动模式, 进而提供了水分子振动依赖的解离性电离图像。我们应用超快飞秒激光结合冷靶反冲离子动量成像谱 (COLTRIMS) 装置, 比较研究了不同激光偏振条件下水分子体系的多次电离及其库仑爆炸过程, 同时考量了水分子的同位素效应对其解离动力学的影响。与 CO_2 等线性分子不同, 三价水分子离子的三体库仑爆炸过程主要通过协同解离机制完成。实验直接证明了水分子库仑爆炸过程发生了从 v 型分布到大角度的弯曲振动过程。如图 (a) 中可看到水分子键角在 170 度和 140 度存在极值分布, 且 170 度的动能释放高于 140 度的动能释放。基于经典增强电离模型, 表明分子的拉伸程度是依赖于分子的键角的。在小角度范围, 角度越小, 释放能量越高, 与较大角度时能量分布相反, 且无明显的极值分布。与线偏光条件下相比 (如 (a) 与 (c) 所示), 角度分布范围与圆偏光基本一致, 但是能量分布截然不同^[1]。线偏光在高于 25 eV 部分的离子产率有显著的增强, 并且其分布几乎不依赖于键角分布, 我们认为这是来自于激光场致重散射过程。以往研究发现, 线性分子重散射效应导致的高能电子分布主要集中在平衡键角附近, 而水分子的振动范畴是在几十飞秒内, 因此与发生在不同电离程度的重散射过程尺度相近, 其高能离子分布不依赖于键角。另外, 线偏光下低动能的分布更强, 对此, 我们根据氢离子动量之间的关系 (如 (d) to (f) 所示), 发现分子的非对称拉伸导致线偏光下更容易产生低动能分布碎片。即圆偏光下更倾向于发生对称拉伸, 而线偏光下两种拉伸模式都发挥了重要的作用 (f)。同时, 实验表明分子的弯曲振动与拉伸振动均会受到同位素效应影响。应用偏振调制的库仑爆炸成像方法, 研究分子的解离性电离过程, 为强场电离解离过程中分子超快振动与电离耦合动力学行为提供了新方案。



图一, (a) (b) 分别为 D_2O 通道一(1,1,1)圆偏与线偏条件下 θ_{CM} 与总动能的关系图, 其中 (c) 为 (a) 和 (b) 的差异图。(d) (e) 分别为 D_2O 通道一圆偏与线偏条件下总动能与分子结构拉伸程度参数 (α) 的关系图, 其中 (f) 为 (d) 和 (e) 的差异图。

关键词: 偏振依赖, 同位素效应

【1】P. Ma, et al. Comparison study for multiple ionization of carbonyl sulfide by linearly and circularly polarized intense femtosecond laser fields using Coulomb explosion imaging[J]. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2018, 51(9): 094002.

319 nm 高功率连续紫外激光的实现及铯原子单光子 Rydberg 激发

白建东、王杰英、刘硕、王泽荣*、何军、王军民**

量子光学与光量子器件国家重点实验室(山西大学), 山西大学光电研究所, 太原 030006

*Email: 948951815@qq.com**Email: wwjimm@sxu.edu.cn

摘要: 由于里德堡原子具有较大的偶极矩、极化率及原子间的相互作用, 这些特性使其在量子信息、量子计算和精密测量等领域体现出重要的应用价值。对于里德堡原子的制备, 单光子激发方式相比于级联多光子激发可以避免由于中间态光子散射和 AC-Stack 频移引起的原子退相干等问题, 但单光子激发所需的紫外激光要求满足的窄线宽、高功率输出等要求具有很大的技术挑战性。基于迅速发展的光纤激光器、光纤放大器和非线性光学领域中的准相位匹配频率转换技术及准位相匹配材料, 我们采用 1560.5 nm 与 1076.9 nm 连续激光通过 PPMgO:LN 非线性晶体高效和频过程实现 637.2 nm 输出, 再经过腔增强谐振倍频过程产生了高功率窄线宽的 318.6 nm 紫外激光输出。采用此紫外激光系统, 我们在铯热原子气室中实现了 $6S_{1/2} \rightarrow nP_{3/2}$ ($n=70-94$) 的单光子跃迁里德堡激发, 实验研究了 $nP_{3/2}$ 态的速度选择光谱及其 A-T 分裂特性。基于里德堡激发光谱 $nP_{3/2}$ 态能量的测量拟合得到了 $nP_{3/2}$ 里德堡态的量子亏损并对相关现象作了理论分析及研究, 为后续在铯冷原子单光子跃迁里德堡激发奠定了坚实的基础。

关键词: 里德堡原子; 和频; 腔增强倍频; 量子亏损; A-T 分裂

参考文献

- 【1】 王军民,白建东,王杰英,刘硕,杨保东,何军.瓦级 319 nm 单频连续紫外激光的实现及铯原子单光子 Rydberg 激发.中国光学, 2019,12(4):701-718
- 【2】 Jieying Wang, Jiandong Bai, Jun He, and Junmin Wang. Single-photon cesium Rydberg excitation spectroscopy using 318.6-nm UV laser and room-temperature vapor cell. *Optics Express*, 2017, 25(19), 22510-22518
- 【3】 Jiandong Bai, Jieying Wang, Shuo Liu, Jun He, and Junmin Wang. Autler-Townes doublet in single-photon Rydberg spectra of cesium atomic vapor with a 319 nm UV laser. *Applied Physics B*, 2019, 125(3):33

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No. 61475091) (No. 61875111)

酞菁锌激发态吸收谱的第一性原理计算

朱红娟、许萍、尹凯、陈纪超、盛晓伟*
 安徽师范大学物理与电子信息学院, 芜湖 241002
 Email: xwsheng@mail.ahnu.edu.cn

摘要: 随着激光技术在工业加工、远程测控、生态监测、医疗技术以及国防科研的广泛应用, 激光对于人的眼睛及光学探测系统的威胁越来越大, 发展光限幅技术是支撑激光技术进一步发展的重要支柱, 具有十分重要的实际意义^[1-2]。非线性吸收中的反饱和吸收是非线性光学中导致光限幅效应的基本原理之一。反饱和吸收行为的实现与否可用分子激发态吸收截面和基态吸收截面比值进行表征。因此, 基于第一性原理对分子的激发态吸收谱进行准确模拟对研究分子是否具有光限幅特性至关重要^[3-5]。酞菁及其衍生物是一类热稳定性和化学稳定性都很好的化合物, 具有高度共轭的二维 π 电子体系, 并且这类分子在可见光区只有几个较窄的吸收峰使得线性透过率较高。酞菁及其衍生物也因此成为一类广受关注的光限幅材料。我们基于含时密度泛函理论对酞菁锌分子在第一个单重激发态的吸收谱进行了计算, 计算得到的吸收峰位置与实验结果高度吻合。在此基础上, 对实验上观测到的吸收峰进行了具体分析。分析结果表明: 实验上观测到的两个吸收峰可分别归属为 S_1 到 S_3 和 S_2 到 S_4 的跃迁。该研究结果将有助于进一步探索酞菁衍生物的光限幅特性。

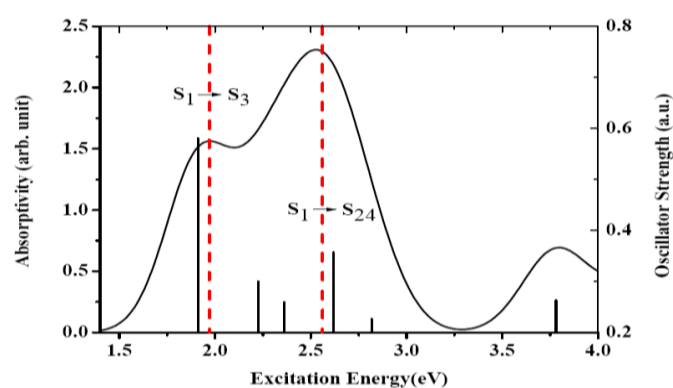


FIG. 1: Simulated absorption spectra for the first singlet excited state (S_1) in good agreement with the experimental results. The spectra are described using the calculated oscillator strengths and the excitation energies broadened with the Gaussian function (FWHM = 0.4 eV). The red dashed lines are the two peaks of the spectrum observed in the experiment. Experimentally, the singlet ESA spectrum were measured only up to 2.76 eV.

参考文献

- [1] D. Jacquemin, E.A. Perpète, I. Ciofini, C. Adamo, *Acc. Chem. Res.*, 2009, 42, 326-334.
- [2] P.H. Bucksbaum, *Science*, 2007, 317, 5839.
- [3] S.A. Fischer, C.J. Cramer, N. Govind, *J. Chem. Theory Comput.*, 2015, 11, 4294-4303.
- [4] S.A. Fischer, C.J. Cramer, N. Govind, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2016, 7, 1387-1391.
- [5] D.N. Bowman, J.C. Asher, S.A. Fischer, C.J. Cramer, N. Govind, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2017, 19, 27452-27462.

含贵金属卤化物分子间强相互作用体系动力学研究

郑锐*, 王红利, 师丽捧

华北水利水电大学, 河南省郑州市金水东路 136 号, 450011

School of Physics & Electronics, North China University of Water Resources and Electric Power, Zhengzhou 450011

E-mail: zhengrui@ncwu.edu.cn

摘要: 分子间强相互作用动力学信息可为多类材料的设计和制备提供支撑。基于量子化学从头算基本理论构建高精度分子间势能面, 通过束缚态计算研究复合物体系 Ar-MX ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}; \text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 和 $\text{H}_2\text{-AgCl}$ 的结构特征、分子间振动模式、振转光谱和同位素效应。在刚性转子近似下, 势能面结果显示 Ar-MX 复合物存在共线性 Ar-M-X 和反线性 M-X-Ar 两种稳定的异构体, 而 $\text{H}_2\text{-AgCl}$ 为双氢 T 型结构, 且该复合物的结合能和分子间间距与单体键长呈线性关系; 波函数结果显示 Ar-MX 共线性异构体能够很好地被束缚在平衡结构附近, 而反线性异构体存在明显离域效应; 对于 $\text{H}_2\text{-AgCl}$ 复合物, $\text{para-H}_2\text{-AgCl}$ 分子间振动模式特征与 Ar-AgCl 非常相似。通过束缚态计算, 能够精确预测这些复合物转动光谱, 最大误差为 1.55%; 此外通过质心移动重构同位分子势能面, 可以精确地研究相应的同位素效应。

关键词: 分子间强相互作用; 势能面; 分子间振动模式; 振转光谱; 同位素效应

参考文献:

- [1] Rui Zheng*, Limin Zheng, Minghui Yang, *Journal of Chemical Physics*, **150**, 164301 (2019).
- [2] Hongli Wang, Lei Xu, Lipeng Shi, Aiqing Zhao, Dapeng Yang, Rui Zheng*, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, **231**, 79 (2019).
- [3] Hongli Wang, Limin Zheng, Dapeng Yang, Rui Zheng*, *Journal of Molecular Spectroscopy*, **353**, 28 (2018).

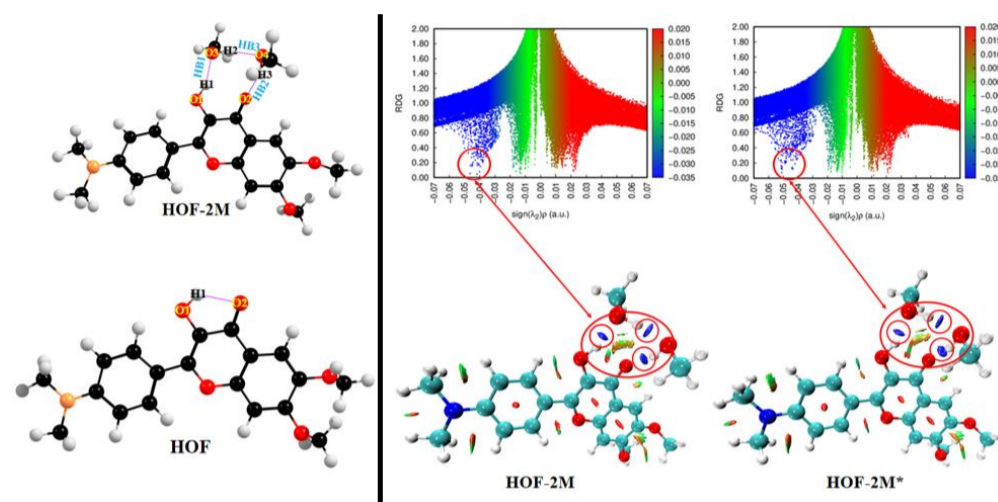
(国家自然科学基金资助, 授予号: 11304095)

The novel excited state intramolecular proton transfer broken by intermolecular hydrogen bonds in HOF system

Songsong Liu^a, Yu Zhao^{a,b}, Changzhe Zhang^a, Lili Lin^a, Yongqing Li^{b,*}, Yuzhi Song^{a,*}

^a Shandong Province Key Laboratory of Medical Physics and Image Processing Technology, School of Physics and Electronics, Shandong Normal University, Jinan 250358, China

^b Department of Physics, Liaoning University, Shenyang 110036, China



Email: yzsong@sdu.edu.cn

Abstract: 2-(4-(dimethylamino)phenyl)-3-hydroxy-6,7-dimethoxy-4Hchromen-4-one (HOF) was synthesized in experiment (Wang *et al.*, *Sens. Actuat. B-Chem.* **277** (2018) 484), and its photophysical and photochemical properties was reported. However the corresponding full theoretical interpretation of mechanisms is inadequate. In the present research, the intermolecular hydrogen bond structures of HOF-methanol complex (HOF-2M) were found, and mechanism of alcohols monitoring of HOF was deeply studied using the density functional theory (DFT) and time-dependent density functional theory (TDDFT). The enhancing mechanism of the excited state hydrogen bond is verified by analyzing the hydrogen bond parameters, infrared spectra and frontier molecular orbitals. Importantly, the reduced density gradient visual analysis and topological quantificational analysis confirm that the intramolecular hydrogen bond of HOF is broken by strong intermolecular hydrogen bonds of HOF-2M using the Atoms-In-Molecule theory. The obtained absorption and emission spectra are found to agree well with the experimental results, and the complete quenched keto-emission in methanol and ethanol solvents provide a suitable sensing mechanism for detecting alcohols. The reaction path of the excited state intramolecular proton transfer for HOF is explained in detail through the constructed potential energy curves.

Figure.1. The geometries and RDG diagrams of HOF-2M in S_0 and S_1 states

Keywords: ESIP; Hydrogen bond; Sensing; RDG; Topology analysis

References

- 【1】** G.J. Zhao, K.L. Han, Hydrogen Bonding in the Electronic Excited State, *Acc. Chem. Res.* 2012, 45(3), 404-413.

Acknowledgments: National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11874241, 11847224 and 11804195), Shandong Province Higher Educational Science and Technology Program (Grant No. J15LJ03), Taishan scholar project of Shandong Province, China Post-doctoral Foundation (No. 2018M630796) and Natural Science Foundation of Shandong Province (No. ZR2018BA034).

Measurement of Quantum Defect of Cesium $nP_{3/2}$ ($n = 70-94$) Rydberg States by using of Single-photon Excitation with Room-temperature Cesium Vapor Cell

Shuo LIU(刘硕), Jiandong BAI(白建东), Zerong Wang(王泽荣), Jun HE(何军), Junmin WANG(王军民)

State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices,

and Institute of Opto-Electronics, Shanxi University

*email: wwjjmm@sxu.edu.cn

Abstract: For its particular characters, Rydberg atoms are widely used in metrology, quantum computation, and quantum information processing. In view of decoherence due to the photon scattering by intermediate state and ac Stark shift induced by excitation beams in multiphoton excitation scheme, we choose single-photon excitation scheme therefore a high-power narrow linewidth 318-nm ultraviolet laser system are developed. After sum-frequency process which utilized 1560-nm and 1077-nm infrared lasers, 318-nm ultraviolet laser is obtained by cavity-enhanced frequency-doubling process. Then we have excited cesium atoms from $6S_{1/2}$ ground state to $nP_{3/2}$ ($n=70-94$) states in a room-temperature cesium cell. Using sub-Doppler spectroscopy, we have observed Rydberg excitation signal of $nP_{3/2}$ ($n=70-94$) states and quantum defects of high-excited states, which are important to the calculation of transition matrix element, are obtained by a high-accuracy wavemeter. After analysis of measured values, the Stark effect is considered for the difference between experimental data and theoretical calculation values. Then we have calculated the Stark shift of cesium $nP_{3/2}$ ($n=70-94$) states due to a weak electric field and use the amount of frequency shift to correct the experimental data, the corrected result is consistent with theoretical model. After investigation and discussion, we confirm that the Rydberg screen effect in room-temperature cesium vapor cell cannot fully screen the external electric field, so there is a weak residual electric field that significantly affect the energy level of Rydberg atoms.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No.61475091, 61875111)

References

- [1] 王杰英 白建东 何军 王军民 *Opt. Express*, **25** (2017) p.22510;
- [2] 王杰英 白建东 何军 王军民 *J. Opt. Soc. Am. B*, **33** (2016) p.2020;
- [3] 王杰英 白建东 何军 王军民 *J. Opt.*, **19** (2017) 045501;
- [4] 白建东 王杰英 刘硕 何军 王军民 *Appl. Phys. B*, **125** (2019) 33;
- [5] 刘硕 白建东 王杰英 何军 王军民 *物理学报*, Vol.**68**, No.7 (2019) 073201.

通过 X 射线来调控过度金属化合物的超快电子自旋动力学

王慧慧、杨勇刚

山西大学量子光学与光量子器件国家重点实验室激光光谱研究所, 太原 030006

Email: huihuiwang2019@sxu.edu.cn

摘要: 近年来, X 射线源的快速发展以及阿秒光谱的诞生为理解复杂的多电子相互作用提供了有效的技术手段, 包括研究外层电子与内层电子的关联相互作用等¹。目前很多电子自旋动力学的研究都是针对外层电子的激发, 这些过程通常是由原子核的运动驱动的^{2,3}。然而, 内层电子由于具有很强的电子关联和自旋轨道耦合, 激发内层电子将会驱动更快的自旋动力学过程⁴。我们将研究过渡金属化合物内层电子的超快自旋动力学, 包括内层电子电离或激发驱动的超快自旋翻转特性及其机制, 以及外场和外界环境对该超快物理过程的影响等问题。这种超快动力学过程可能需要考虑上千个耦合的电子态, 我们发展了一种处理多电子问题的方法——“基于密度矩阵的含时电子组态相互作用”来准确描述电子关联及自旋轨道相互作用。具体来说我们用 X 射线激发内层电子, 制备复杂的量子叠加态, 然后追踪过渡金属化合物的超快电子自旋动力学。外场的中心频率、振幅、脉宽等对不同自旋态的占比有很大影响, 从理论上详细分析这种超快物理过程可以深入理解超快自旋动力学机制, 并为超快激光实验提供理论依据和设计方案。

关键词: 超快自旋动力学, 自旋轨道耦合, 电子关联, 约化密度矩阵

参考文献

- 【1】 G. Sansone, T. Pfeifer, K. Simeonidis, and A. I. Kuleff, Electron Correlation in Real Time, *Chem. Phys. Phys. Chem.* 2012, 13, 661-680.
- 【2】 W. Zhang *et al.*, Manipulating Charge Transfer Excited State Relaxation and Spin Crossover in Iron Coordination Complexes with Ligand Substitution, *Chem. Sci.* 2017, 8, 515-523.
- 【3】 G. Auböck, M. Chergui, Sub-50-fs Photoinduced Spin Crossover in $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$, *Nat. Chem.* 2015, 7, 629-633.
- 【4】 H. Wang, S. I. Bokarev, S. G. Aziz and O. Kühn, Ultrafast Spin-State Dynamics in Transition-Metal Complexes Triggered by Soft-X-Ray Light, *Phys. Rev. Lett.* 2017, 118, 023001.

基金项目: Deanship of Scientific Research (DSR), King Abdulaziz University, Jeddah, (NO. D-003-435)

原子干涉仪检验弱等效原理

何川^{1,3}, 闫思彤^{1,3}, 汪琪^{1,3}, 段维涛^{1,3}, 徐润东^{1,3}, 周超¹, 冀宇航¹, Sachin Bathwal¹, 侯卓^{1,3}, 陈曦^{1,2}, 周林^{1,2}, 王谨^{1,2}, 詹明生^{1,2}

¹ 中国科学院武汉物理与数学研究所, 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071;

² 中国科学院冷原子物理中心, 武汉 430071;

³ 中国科学院大学, 北京 100049;

⁴ 中国科学院理论物理研究所, 北京 100190

Email: wangqi@wipm.ac.cn

摘要: 等效原理是广义相对论两大基本假设之一, 其中包括弱等效原理。我们采用 ^{85}Rb 和 ^{87}Rb 组合, 进行弱等效原理的检验。通过发展双原子喷泉、四波双衍射拉曼等技术, 我们实现了双组分原子干涉仪, 并实现了对等效原理的高精度检验。实验测量给出了相应的 η 值。在 $^{87}\text{Rb} | F = 1 \rangle$ 与 $^{85}\text{Rb} | F = 2 \rangle$ 的测量组合中, 积分时间为 8960s 时, η 的统计不确定度为 1.8×10^{-10} 。通过各种系统误差修正, 我们给出该组合的等效原理测量结果为 $\eta = (-4.4 \pm 6.7) \times 10^{-10}$ 。

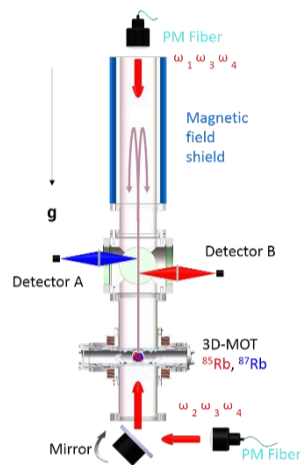


图 1 实验装置示意图

TABLE I. The error budget

Parameters	$\eta (\times 10^{-10})$	Uncertainty ($\times 10^{-10}$)
Experimental data	49426.6	1.8
Effective wave vector	49435.5	0.5
Detector difference	1.0	2.5
Coriolis effect	0	2.0
Wave-front aberration	0	5.0
ac Stark shift	0	0.6
Quadratic Zeeman shift	0	2.0
Gravity gradient	-5.5	1.2
Others	0	1.0
Total	-4.4	6.7

表 1 系统误差表

相较于 2015 年的结果, 我们的实验精度提高了近 80 倍。其主要措施包括: 真空及原子源系统升级, 拉曼激光系统的改进, 转动补偿以及 10m 级磁屏蔽系统升级改造。之前的主要系统误差项, 如科里奥利效应等, 降低了 2 个数量级左右。除此之外, 我们也在对拥有不同轨道角动量的 ^{85}Rb 和 ^{87}Rb 组合进行测量 (例如: $^{87}\text{Rb} | F = 2 \rangle$ 与 $^{85}\text{Rb} | F = 3 \rangle$ 、 $^{87}\text{Rb} | F = 1 \rangle$ 与 $^{85}\text{Rb} | F = 3 \rangle$ 、 $^{87}\text{Rb} | F = 2 \rangle$ 与 $^{85}\text{Rb} | F = 2 \rangle$), 从而开展质量-角动量联合检验。这项工作为 ^{87}Rb 和 ^{85}Rb 原子对的测量提供了新的等效原理破缺上限。

关键词: 等效原理检验, 原子干涉仪

参考文献

[1] Lin Zhou et al. Test of equivalence principle at 10^{-8} level by a dual species doublediffraction Raman atom interferometer. Phys. Rev. Lett. 115, 013004(2015).

[2] Lin Zhou et al. United test of the equivalence principle at 10^{-10} level using mass and internal energy specified atoms, arXiv:1904.07096v2.

基金项目: 国家重点研发项目 (NO. 2016YFA0302002);

国家自然科学基金项目 (NO. 91536221);

中国科学院战略性先导科技专项 (NO. XDB21010100) 等。

冷原子实验中有效地维持原子源和真空室之间高压差的装置

张迪¹、李玉清^{1,2}、马杰^{1,2}

山西大学国家重点实验室激光光谱研究所, 太原 030006

Email: lyqing2006@sxu.edu.cn (李玉清)

摘要: 随着过去三十年来激光冷却中性原子技术的蓬勃发展, 超冷原子作为原子、分子和光物理学研究领域的一种新方法和新内容, 取得了许多令人瞩目的标志性成就。特别是, 原子玻色爱因斯坦凝聚 (BEC) 和简并费米气体的实现, 而一个超高的真空环境是实验顺利进行的必要保证。迄今为止国内外已有许多小组利用带有塞曼减速器的二级真空系统实现了量子气体的简并。在这里, 我们报告了一种超高真空装置, 在使用带有塞曼减速器的二级真空系统的基础上, 我们在 Cs oven 和 oven chamber 之间的 nipple 管处设计了一种冷却装置, 通过使用 TEC, 调节温控使 nipple 管处温度降至 10°C 左右, 这样可以将大量的铯原子冷却在 nipple 管内壁, 阻止其进入 oven chamber 从而提高 oven chamber 的真空度。在实际测量中, 当我们将铯原子加热到 60°C 时, 我们的一级真空达到了 3.6×10^{-9} Pa, 测得的二级真空为 1.8×10^{-9} Pa。

随后我们采用一系列激光冷却的方法来逐渐降低铯原子温度, 首先利用 MOT 冷却并俘获经塞曼减速器后的低速铯原子, 通过优化相关参数, 我们在 MOT 中获得了温度约为 80 μ K, 数目为 4×10^8 个铯原子。之后对铯原子样品进行 CMOT 和 molasses 冷却, 使铯原子样品温度降至十微开尔文以下, 并在此基础上进行拉曼边带冷却进一步降低铯原子团温度至两微开尔文以下, 并制备到塞曼能级 $F=3, m_F=3$ 上, 为后期的蒸发冷却奠定了基础。

参考文献:

- 【1】 S. A. Hopkins *et al*, A versatile dual-species Zeeman slower for caesium and ytterbium, *Rev. Sci. Instrum.* 2016, 87, 043109.
- 【2】 E. W. Streed *et al*, Large atom number Bose-Einstein condensate machines, *Rev. Sci. Instrum.* 2006, 77, 023106
- 【3】 W. Bowden *et al*, An adaptable dual species effusive source and Zeeman slower design demonstrated with Rb and Li, *Rev. Sci. Instrum.* 2016, 87, 043111
- 【4】 C. Bradley *et al*, Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number, *Phys. Rev. Lett.* 1997, 78, 985

基金项目: 国家重点研发项目 (NO.2017YFA0304203), 国家自然科学基金项目 (NO.61722507、61675121 和 61705123), 山西省应用基础研究项目 (NO.201701D221002) 等。

二氧化碳二聚体在强飞秒激光场中的电离解离动力学研究

宋盼¹、王小伟¹、孟从森¹、吕治辉¹、张栋文¹、赵增秀^{1*}、袁建民^{1,2†}

1 国防科技大学物理系, 湖南长沙 410073

2 中国工程物理研究院研究生院, 北京 100193

*Email: zhaozengxiu@nudt.edu.cn †Email: jmyuan@nudt.edu.cn

摘要: 我们利用冷靶反冲离子动量成像谱仪 (COLTRIMS) 的符合测量技术^[1], 研究了以范德瓦耳斯力结合的二氧化碳二聚体(CO₂)₂在强飞秒激光场下的三电离解离动力学过程^[2]。实验表明(CO₂)₂³⁺破裂成 CO₂⁺+ CO⁺+ O⁺的三体解离过程存在两种解离机制, 即同步解离和顺序解离, 并且这两个解离通道与 CO₂²⁺解离成 CO⁺+ O⁺的瞬时解离通道和亚稳态解离通道^[3]相一致。通过库仑爆炸成像获得了二聚体分子清晰的结构, 我们追踪碎片离子的运动方向, 发现同步解离过程中, O⁺来自靠近二聚体几何中心的那个 C=O 键的断裂。这些结果表明在团簇复合体中, 单体的动力学特性可以得到保留并且出现了新的动力学过程。最后我们测量了(CO₂)₂在不同解离通道下产生的碎片离子的角分布, 结果表明二聚体分子的结构与激光场的相对取向决定了电离动力学。

我们的实验采用中心波长为 790 nm, 脉宽为 25 fs, 重复频率 10 KHz 的飞秒激光脉冲, 激光聚焦后峰值光强为 $4.5 \times 10^{14} \text{W/cm}^2$ 。CO₂的二聚体由 8 bar 的二氧化碳气体经过 30 μm 的喷嘴超音速膨胀时产生。如下图所示, 我们给出了三体解离产生的碎片离子的动量分布和不同解离通道下碎片离子的角分布。我们分析了(CO₂)₂³⁺三体解离过程产生的 CO₂⁺离子的动量分布, 并用两个高斯函数的和拟合了实验数据, 我们认为这两个拟合的峰分别对应同步解离和顺序解离通道。

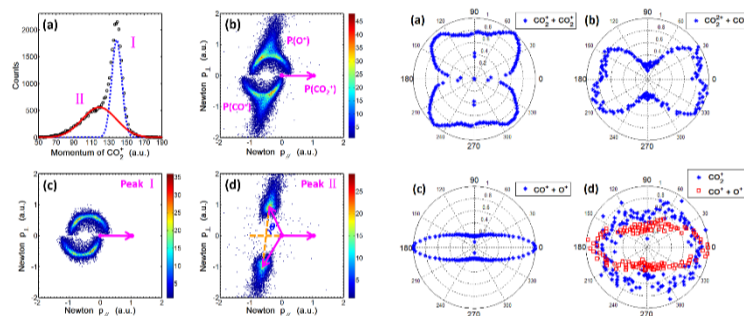


图 1 二聚体三体解离产生的碎片离子的动量分布和不同解离通道下碎片离子的角分布。

关键词: COLTRIMS, 三电离解离动力学, 顺序解离, 同步解离, 离子角分布

参考文献:

- [1] J. Ullrich *et al*, *Journal of Physics B Atomic Molecular & Optical Physics*. 1997, 30(13),415-422.
- [2] Yameng Fan *et al*, *Chemical Physics Letters*. 2016,653,108-111.
- [3] Vandana Sharma *et al*, *J. Phys. Chem. A*. 2007, 111, 10205-10211.

基金项目: 国家重点基础研究发展计划 (2013CB922203), 国家重大研究计划 (No. 91850201)

锶原子在强激光场作用下的非序列双电离研究

雷越, 李万凯, 李兴, 胡文惠, 张栋栋*, 罗嗣佐*, 丁大军*
吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012

摘要: 强激光作用下原子分子的非次序双电离在强场物理研究中具有重要的意义, 揭示了双电离过程中电子关联效应[1], 其中双电离机制可以由次序双电离和非次序双电离进行区分。金属原子具有外壳活跃电子, 其双电离过程一直是科研工作者的关注热点[2]。我们实验研究了金属 Sr 在强激光作用下的电离过程, 该原子是一个典型的最外层有两个活跃电子的金属原子其第一电离势和第二电离势分别为 5.69 eV 和 11.03 eV。实验使用 50 fs、800 nm 的激光与金属原子束相互作用结合速度成像系统实现电离过程中离子和电子的探测。我们得到了不同偏振条件下金属 Sr 一价和二价离子产率随光强变化, 其中近圆偏激光条件下得到的离子强度随光强的变化结果如图 1 所示, 从二价离子与一价离子的产率图和比率图中可以看到在较低光强下, 二价离子产率出现“knee”结构, 表明 Sr 原子在圆偏激光场中出现了非次序双电离的现象, 其机制可能是和金属 Mg 原子类似, 可以理解为重碰撞激发再电离机制。进一步我们将结合光电子探测和理论分析深入理解金属在强激光作用下的电离动力学。

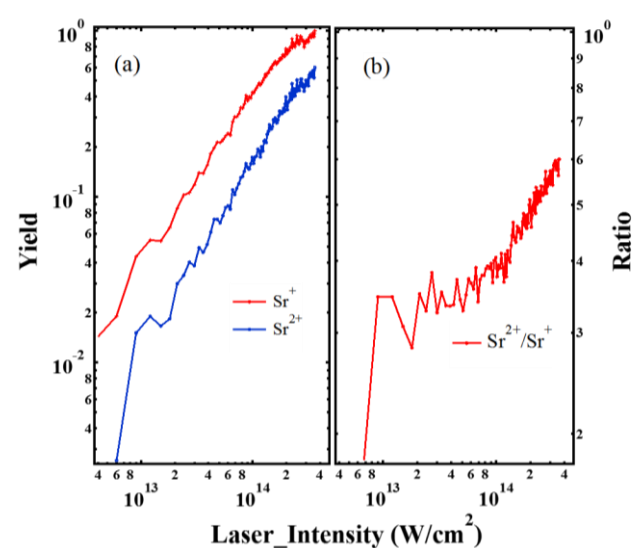


图 1 (a) 圆偏光下 Sr^+ 和 Sr^{2+} 的产率曲线; (b) $\text{Sr}^{2+}/\text{Sr}^+$ 离子产率与强度的比值。

参考文献

- 【1】 X Wang, JH Eberly, New Journal of Physics 12 093047 (2010)
- 【2】 G. D. Gillen, M. A. Walker, and L. D. Van Woerkom, PhysRevA.64.043413 (2001)

分子平面内非线性激子动力学的等离激元效应

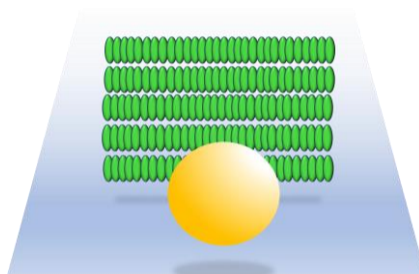
符晓倩

北京科技大学数理学院, 北京 100083

Email: S20180761@xs.ustb.edu.cn

摘要: 金属纳米粒子 (metal nanoparticles, MNP) 的表面等离激元增强效应是当前纳米材料科学领域的研究热点。研究表明, 利用等离激元增强效应可以提高分子的光激发效率, 且高的光激发效率对有机光电材料是至关重要的。众所周知在新材料中, 二维材料在减小空间尺度的同时, 还可以提高器件的各方面性能。因此研究二维材料的基础理论和实际应用成为了当下最热门的研究方向之一。

本论文课题主要针对二维材料中, 分子平面内非线性激子动力学的等离激元效应进行研究, 通过使用全同的单能级分子构建耦合多分子链模型, 使用密度矩阵理论进行描述, 在单分子链系统哈密顿量的基础上, 进而推导出多分子链系统的哈密顿量, 之后在这个系统上又加入了金属纳米粒子, 然后构建出该系统的哈密顿量, 再通过可计算化程序模拟出数值结果, 讨论了分子平面与金属纳米粒子在不同相对位置下及其分子的不同位型对表面等离激元增强的影响。论文在构建多链-金属纳米粒子系统的哈密顿量时, 考虑到该系统与外界之间的相互作用, 应用密度矩阵理论描述其动力学过程, 而没有用传统的含时薛定谔方程, 同时由于分子间距远远大于分子尺寸, 论文中采用偶极-偶极近似和旋波近似导出系统的动力学过程。



关键词: 金属纳米粒子 密度矩阵 偶极-偶极近似

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11174029)

周期调制的弱相互作用玻色气体的动量分布和结构因子的动力学

刘宁、涂展春

北京师范大学物理学系, 北京市海淀区新街口外大街 19 号 100875

Email: ningliu@mail.bnu.edu.cn

摘要: 在处理弱相互作用玻色气体的问题中, Bogoliubov 方法显示了巨大的威力。我们可以通过构建含时算符演化矩阵, 给出当玻色子之间相互作用可调时的动力学, 这里演化矩阵的矩阵元为时间相关的 Bogoliubov 变换权重。把哈密顿量映射到时间相关谐振子的坐标-动量的正交表象中, 利用算符的 Heisenberg 运动方程, 可得到矩阵元相关的演化函数的时间演化方程, 便可以得到系统的演化动力学[1]。

几十年来, 具有周期调制势的量子多体或者少体问题一直吸引着众多研究者的关注。最著名的例子之一就是实验发现了在超晶格 Bloch 振荡[2]。理论的发展表明, 即使在弱相互作用的情况下, 通过周期性调制耦合常数就可以剧烈地改变密度分布[3]。于是, 我们基于时间相关的 Bogoliubov 方法, 考虑了具有周期性调制的耦合常数, 发现演化方程是可解的 Mathieu 方程。我们展示了只有当动能和耦合常数满足一系列的本征关系时, 我们才可以得到系统周期性的动力学。而且, 我们也给出了在适当的参数下, 系统演化的稳定和不稳定的动力学图像。此外我们还对比了零温和有限温的结果。

关键词: Bogoliubov 方法, 周期调制相互作用, 玻色气体, 耦合常数

参考文献

【1】 G.I.Martone *et al.*, Momentum distribution and coherence of a weakly interacting Bose gas after a quench, *Phys.Rev.A.* 2018, 98,063617.

【2】 K.Leo *et al.*, Observation of Bloch oscillations in a semiconductor superlattice, *Solid State Communications* 1992, 84(10), 943

【3】 A. G. Volosniev *et al.*, Real-time dynamics of an impurity in an ideal Bose gas in a trap, *Phys.Rev.A* 2015, 92,023623

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11675017)

超强激光场中的光电效应

刘爱华、黎根亮, 王宁月, 王俊, 费德厚, 丁大军
 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012
 Email: aihualiu@jlu.edu.cn

摘要: 光电效应作为量子力学的发端, 在当代物理中有极其重要的地位。近年来, 世界各地在努力发展新一代自由电子激光光源, 光强可望达到 $10^{24}\text{W}/\text{cm}^2$ 。在这光强下, 将会有许多新物理新效应被发现。比如原子稳定化[1]现象。在高频率超强的线偏振激光下, 由于原子稳定化出现, 光电效应会出现一些新的现象: 氢原子只在激光脉冲的上升沿和下降沿发生电离并产生光电子波包[2, 3]。由于前后两个电离最大的时刻有着同样 Stark 能级移动, 两列光电子波包产生干涉, 从而在其光电子能谱上出现干涉条纹。这种现象被称为动态干涉[3]。

通过全维数值求解含时薛定谔方程, 我们发现在基态氢原子在高频超高强度的圆偏振和椭圆偏振激光下也能观测到动态干涉现象。在一阶微扰理论中, 椭圆偏振和圆偏振激光的光电子谱可以看成是其两个线偏振分量的光电子谱的叠加结果。在激光峰值强度小于 $10^{18}\text{W}/\text{cm}^2$, 椭圆偏振和圆偏振激光下基态氢原子的光电子谱依然基本满足这一规律, 但对于更高的激光强度, 比如 $5 \times 10^{18}\text{W}/\text{cm}^2$, 光电子动量谱及角分布变得复杂, 需要用到高阶微扰进行修正。

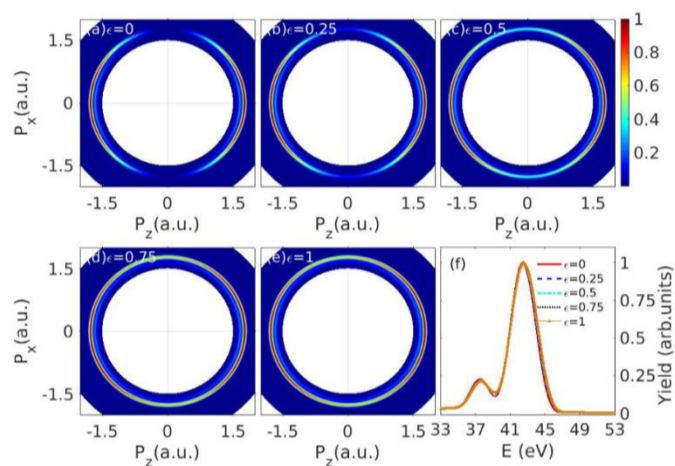


图 1 基态氢原子的光电离的光电子动量分布(a-e)和光电子能谱(f)。

关键词: 光电效应, 动态干涉, 光电子谱, 动量分布

参考文献

- 【1】 J. H. Eberly and K. C. Kulander 1993 *Science* **262**, 5137.
- 【2】 J. Guo, F. Guo, J. Chen and Y. Yang 2018 *Acta Phys. Sin.* **67**, 073202.
- 【3】 W. Jiang and J. Burgdörfer 2018 *Opt. Express* **26**,19921.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11774131, 91850114, 11604119 和 11627807)。

Frustrated Double Ionization of Argon Atoms in Strong Laser Fields

Jingkun Xu (许景焜)、[Yingbin Li](#) (李盈宾)、Benhai Yu (余本海)
College of Physics and electronic Engineering, Xinyang Normal University, Xinyang 464000
Email: liyibin2008@163.com

Abstract: We theoretically investigated the electron dynamics in frustrated double ionization (FDI) of Argon atom using a three-dimensional classical ensemble model. Our results show that the probability curves of FDI increases nearly linearly at low peak laser intensity followed by a sharp decrease in slope at high peak laser intensity [1], and compared with DI, FDI prefer low-intensity and short-wavelength laser pulses. Back analysis reveals that FDI trajectories can be associated with RESI channel [2]. A portion of the trapped electrons come from the returning electrons whose final ionization velocity are similar to the vector potential corresponding to the final ionization time due to a weak recollision. The other parts are from the struck electrons which remain in the excited state after recollision until be pulled out after a laser maximum, and with the increase of the laser wavelengths, the time windows of the final ionization decrease, which can be explained by the increase of the peak vector potentials and the principal quantum numbers of the trapped electron.

Keywords: frustrated double ionization RESI time window of the final ionization

Reference:

- 【1】 C. N. Zhao Lei *et al.*, Rydbeg state excitations and double ionizations of different atoms in strong femtosecond laser field, *Acta. Physica sinica.*, 65, 223201 (2016)
- 【2】 K. N. Shomsky *et al.*, *Frustrated nonsequential double ionization: A classical model*, *PhysRevA*.79. 061402(2009)

Fund program: National Natural Science Foundation of China (Nos. 61475132, 11747077)

采用紫外烧孔光谱技术辨认有机分子异构物

郝佳钰、赵岩、李昌勇、贾锁堂

量子光学和光量子器件国家重点实验室, 山西大学激光光谱研究所, 太原 030006

Email: lichyong@sxu.edu.cn

摘要: 分子的不同异构物具有相同质量, 仅仅根据飞行时间质谱技术无法分辨, 但它们的电子态能量、电子跃迁光谱、振动特性等都有一定差异。分辨不同异构物有多种方法, 一种是飞行时间质谱结合精确的绝热电离能辨认不同异构物[1,2]。这种方法容易受到分子热带的干扰造成误判。另一种办法是观察荧光光谱特性判断异构物的存在及其振动特性[3], 该方法也可能产生一些错误[4]。另外根据不同异构物具有不同转动常数, 测量高分辨率转动光谱获得转动常数结合理论计算辨别异构物似乎也是一种辨别异构物的有效方法[4]。上述方法都可以用来分辨异构物, 但他们对于同一种分子的异构物的辨认有时会产生不同结果。目前在超声分子束中采用飞行时间质谱结合烧孔光谱技术进行异构物的辨认是一种较为可靠和有效的方法[5]。我们采用双色和三色紫外烧孔光谱技术首次分别确认了对异丙基苯甲醚和间甲氧基苯腈在超声分子束中分别存在两种异构物, 确定了每种异构物精确的激发能、电离能、及电子激发态的振动特性。实验测量的对异丙基苯甲醚的 *cis* 和 *trans* 异构体的第一电子激发能分别为 $35676 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$ 和 $35625 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$; 电离能分别为: $63507 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ 和 $63454 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ 。间甲氧基苯腈的 *cis* 和 *trans* 异构体的第一电子激发能分别为 $34379 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$ 和 $34190 \pm 2 \text{ cm}^{-1}$, 绝热电离能分别为 $70948 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ 和 $70937 \pm 5 \text{ cm}^{-1}$ 。结合量子化学理论计算分析并讨论了各异构物的分子结构和能量, 对观察到的谱带进行了详细分析和振动模式指认。

关键词: 异构物 超声分子束 飞行时间质谱 紫外烧孔光谱 异丙基苯甲醚 间甲氧基苯腈

参考文献

- 【1】 W. Dai *et al.*, Conformational preferences and isomerization upon excitation/ionization of 2-methoxypyridine and 2-N-methylaminopyridine, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 6211-6226
- 【2】 Changyong Li, *et al.*, Mass-analyzed threshold ionization spectroscopy of the rotamers of p-n-propylphenol cations and configuration effect, *J. Chem. Phys.*, 2005, 122, 044311
- 【3】 P. J. Breen, *et al.*, Spectroscopic Observation and Geometry Assignment of the Minimum Energy Conformations of Methoxy-Substituted Benzenes, *J. Am. Chem. Soc.* 1989, 111, 1958-1968
- 【4】 M. Schneider, *et al.*, Rotationally resolved electronic spectroscopy of the rotamers of 1,3-dimethoxybenzene, *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2017, 19, 21364
- 【5】 W. Y. Sohn *et al.*, Entropic effects make a more tightly folded conformer of a b-amino acid less stable: UV-UV hole burning and IR dip spectroscopy of L-b3-homotryptophan using a laser desorption supersonic jet technique, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 19979

基金项目: 国家自然科学基金 (NO.61575115, 61378039, 11434007)

镁铝等离子体不透明度研究

胡峰、孙言

徐州工程学院数学与物理科学学院, 徐州 221018

Email: hufeng@xzit.edu.cn

摘要: 等离子体的光谱蕴含着丰富的信息, 因此在实验中, 往往通过测量等离子体的吸收谱或者发射谱, 分析谱线强度和轮廓来诊断等离子体的电子温度和密度等一系列的参数, 同时也可以对等离子体所处的平衡状态进行分析判断。不透明度研究中, 用低 Z 的镁、铝元素作掺杂元素或示踪元素, 通过测量其类氢或者类氦离子的共振线与伴线强度比, 诊断激光等离子体的温度和密度。受制于计算能力等因素影响, 早期对于铝等离子体的计算大多采用近似方法。本文使用基于多组态 Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) 方法和相对论组态相互作用的 GRASP2K 原子结构程序给出细致组态, 结合非局域热动平衡模型, 发现随温度的增加, 不同密度等离子体的平均离化度都呈现快速增大到平台再非常缓慢增加的趋势。给出了平均离化度、Rosseland 平均不透明度、Planck 平均不透明度、压力和费米能级随温度密度的变化关系, 同时给出不同温度密度条件下等离子体的合成谱。为将来实验开展镁等离子体的研究提供了理论指导。

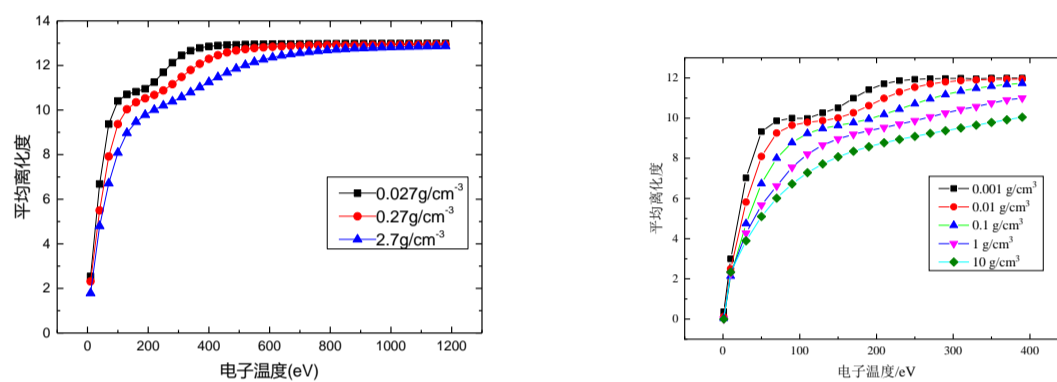


图 1 铝、镁等离子体不同温度的平均离化度

关键词: 平均离化度、辐射不透明度、细致组态

参考文献

【1】 F.Hu, et al. A K-shell model for laser-produced Al plasma. *Radiation Effects and Defects in solids*, 2015, 170(5): 407-413

【2】 F. Hu, et al. Study on the average ionization state for Aluminum plasma. *Journal of Xuzhou Institute of Technology*, 2018, 33(1):37-40

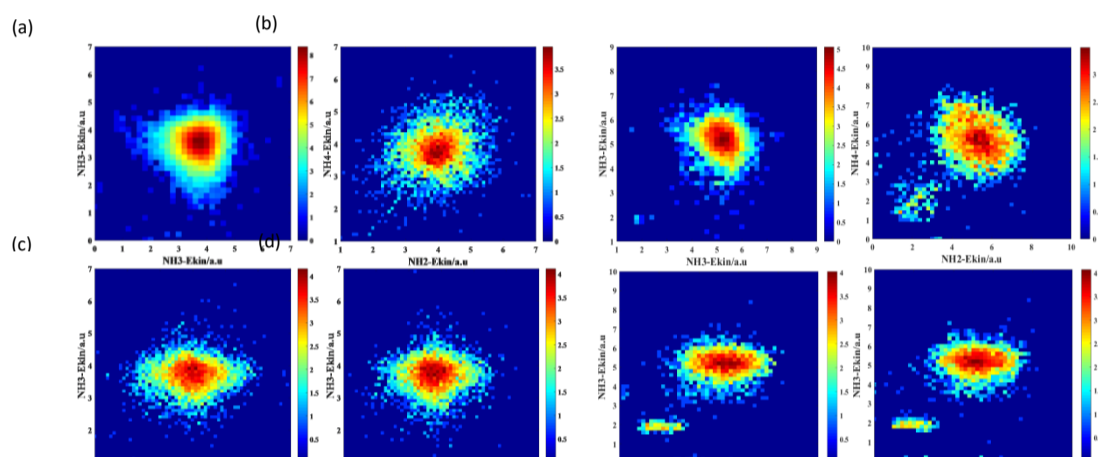
基金项目: 江苏省高等学校自然科学研究面上项目 (17KJB140025)

$(\text{NH}_3)_n$ 团簇在强激光场下的质子转移效应

尹钟钰、余西涛、于嘉琪、罗嗣佐*、丁大军*

吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012

摘要: 分子间的质子转移广泛存在于多种物理和化学反应中, 研究分子间的质子转移有助于人们更好的理解含氢分子在强激光场下的超快过程[1]。本文利用中心波长为 800nm, 脉宽为 35fs 的圆偏振激光, 结合冷靶反冲离子动量成像谱仪(COLTRIMS)研究了 $(\text{NH}_3)_n$ 团簇在飞秒强激光作用下的分子间质子转移现象。实验通过离子多体符合测量确认了分子间的质子转移现象, 结合能量关联图(图 1、2)发现 $(\text{NH}_3)_3$ 在激光脉冲的前沿被部分电离, 其中的一个 NH_3^+ 由于库仑排斥作用发生解离, 由于质子转移的时间尺度非常短, 剩余的 $\text{NH}_3^+-\text{NH}_3$ 会在激光脉冲作用的过程中被电离并发生质子转移。我们在 $(\text{NH}_3)_4$ 团簇中也观察到了类似的现象, 两个 NH_3^+ 会在库仑爆炸前先发生解离。此外, 我们还观察到了 $(\text{NH}_3)_4$ 发生质子转移的两种不同路径: 相邻分子间转移和相对分子间转移, 随着质子转移数的增加, 相对分子间的质子转移过程也变得越来困难。进一步本文观察到了 $(\text{NH}_3)_n$ 团簇在强激光场作用下质子转移过程中的团簇结构变化, 该研究对理解含氢分子间的质子转移效应具有重要的意义。

图 1 $\text{NH}_2\text{-NH}_4\text{-NH}_3$ 分子间的能量关联图 图 2 $\text{NH}_2\text{-NH}_4\text{-NH}_3\text{-NH}_3$ 分子间的能量关联图.

关键词: 质子转移、库仑爆炸、团簇

参考文献

[1] Bing Yuan, Joong-Won Shin, and Elliot R. Bernstein, Dynamics and fragmentation of van der Waals and hydrogen bonded cluster cations, *J. Chem. Phys.* 2016, 144, 144315.

[2] P. Farmanara, V. Stert, H.-H. Ritze, W. Radloff, and I. V. Hertel, Control of the fragmentation of excited ammonia clusters by femtosecond infrared laser pulses, *J. Chem. Phys.* 2001, 115, 277.

*国家自然科学基金(11534004, 11704148, 11627807)项目资助

H₂S⁺(X⁴A'')和(X²A'')全维势能面的构建及反应动力学研究

宋玉志、高守宝、孟庆田
 山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250358
 Email: yzsong@sdu.edu.cn

摘要: 分子反应动力学主要是通过研究原子与分子、分子与分子间的相互作用以及反应物和产物的量子态分布等性质来研究化学反应的动态过程和微观机理, 是原子与分子物理学科重要的研究内容。为了得到准确的动力学结果, 构建分子反应体系高精度的全维势能面是非常关键的, 因为分子势能面是研究分子结构、分子光谱及分子振动能级等性质的基础, 势能面的精确度直接影响反应动力学结果。我们构建了 HLi₂、H₂O⁺、HCS、H₂S⁺、HS₂ 以及 FH₂ 等三原子分子体系基态和激发态的全维势能面, 研究了分子平衡位置、过渡态及鞍点的几何结构、能量和振动频率等性质, 得到了最小能量反应路径。利用准经典轨线和含时波包方法研究了 H+Li₂、O+H₂⁺以及 S+SH 反应的动力学性质, 计算了反应的速率常数、微分截面和积分截面等动力学参数, 分析了反应过程中的同位素效应、量子隧穿效应、科里奥利耦合效应和非绝热效应等, 在原子水平和量子态层次上揭示了反应的微观反应机理。报告将介绍最近构建的 H₂S⁺(X⁴A'')和(X²A'')两个电子态的全维势能面的特征, 以及 S⁺(⁴S)+ H₂(X¹Σ_g)和 S⁺(²D)+ H₂(X¹Σ_g)反应的动力学性质。

关键词: 全维势能面, 分子反应动力学, 激发态, 含时波包, 准经典轨线

参考文献

- [1] **Yuzhi Song***, Wenyi Zhang, Qingtian Meng and Shoubao Gao, Studies on Coriolis coupling effect on the reaction dynamics of using the time dependent wave packet method, *J. Phys. B*, 2019, **52**: 105201.
- [2] L. L. Zhang, S. B. Gao, Q. T. Meng*, J. Pan, and **Y. Z. Song***, Accurate potential energy surface of H₂S⁺(X²A'') via extrapolation to the complete basis set limit and its use in dynamics study of S⁺(D₂)+H₂(X¹Σ_g⁺) reaction, *J. Chem. Phys.*, 2018, 149:154303.
- [3] **Y. Z. Song***, Y. Zhang, S. B. Gao, Q. T. Meng, C. K. Wang and M. Y. Ballester*, A global potential energy surface for H₂S⁺(X⁴A'') and quasi-classical trajectory study of the S⁺(⁴S) + H₂(X¹Σ_g) reaction, *Mol. Phys.*, 2018, 116(1): 129-141.
- [4] L. L. Zhang, **Y. Z. Song***, S. B. Gao, and Q. T. Meng*, Globally Accurate Potential Energy Surface for HCS(A²A'') by Extrapolation to the Complete Basis Set Limit, *J. Phys. Chem. A*, 2018,122:4390-4398.
- [5] L. Guo, H. Y. Ma, L. L. Zhang, **Y. Z. Song*** and Y. Q. Li*, Accurate global potential energy surface for the ground state of CH₂⁺ by extrapolation to the complete basis set limit, *RSC Adv.*, 2018, 8: 13635-13642.
- [6] **Y. Z. Song***, L. L. Zhang, E. Cao, Q. T. Meng, and M. Y. Ballester, A globally accurate potential energy surface of HS₂(A²A') and studies on the reaction dynamic of H(²S)+S₂(a¹Δ_g), *Theo. Chem. Acc.*, 2017, 136: 38.
- [7] **Y. Z. Song***, L. L. Zhang, S. B. Gao, and Q. T. Meng*, Globally accurate potential energy surface for the ground-state HCS(X²A') and its use in reaction dynamics, *Sci. Rep.*, 2016, **6**, 37734.
- [8] S. B. Gao, L. L. Zhang, **Y. Z. Song***, and Q. T. Meng*, Coriolis coupling effects in the reaction H + Li₂ → LiH + Li: A time-dependent wave packet investigation, *Chem. Phys. Lett.*, 2016, 651, 233-237.

基金项目: 国家自然科学基金(11304185, 11874241)

团簇组装铁性纳米结构的多物理场耦合

赵世峰

内蒙古大学物理科学与技术学院, 呼和浩特 010021

Email: zhshf@imu.edu.cn

摘要: 铁性材料的多种铁有序以及它们之间的多物理场耦合效应使得材料具有奇异的物理性质, 并能够通过施加外场实现对其物理性质的调控。例如, 铁电性与铁磁性的耦合产生磁电耦合, 铁电极化与光子耦合产生铁电光伏效应。作为一种低维纳米结构, 团簇由于其不同于单个原子分子, 又不同于大块固体的奇特性质能够在多物理场耦合效应中实现有效调控。作者在近些年的研究中, 基于低能团簇束流沉积技术, 利用团簇易于自由组装各种形式的优势, 发展了团簇组装的多种铁性纳米结构的多物理场耦合调控。实现了磁场-力场、磁场-力场-电场、磁场-力场-光场-电场等物理场的耦合调控, 并实现了物理效应的极大提升。例如, 通过团簇的自由组装特性, 实现了团簇组装的层 1-3 结构的磁电复合结构, 克服了衬底 2-2 型层间复合薄膜的钳制作用, 磁电效应获得极大提升; [1, 2] 通过团簇组装的核壳结构的优势, 获得了交换偏置磁电效应; [3] 通过团簇组装的巨磁致伸缩纳米结构, 实现力场对铁电光伏效应的巨大提升; 利用磁畴结构的有效调控, 在永磁材料中获得了较强的磁致伸缩效应。[4]

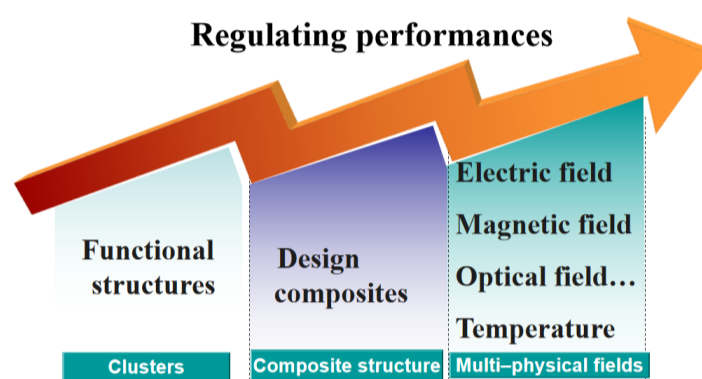


图1 团簇组装纳米结构多物理场耦合调控

关键词: 团簇, 物理场, 调控, 铁性

参考文献

[1] Yulong Bai, Ning Jiang, Shifeng Zhao*, *Nanoscale*, 2018, 10, 9816-9821. Inside Back Cover

[2] Shifeng Zhao, Jian-guo Wan, Mengliang Yao, Fengqi Song, and Guanghou Wang, *Applied Physics Letters*, 97, 212902(2010)

[3] Yulong Bai, Bo Yang, Hao Zhang, Xin Wu, Ning Jiang, Shifeng Zhao*, *Acta Materialia*, 2018, 155, 166-174.

[4] Yulong Bai, Bo Yang, Fei Guo, Qingshan Lu, Shifeng Zhao*, *Nanotechnology*, 2017, 28, 455705

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 11864028, 11564028) .

F₂SO 分子非谐力场和光谱常数的理论研究

郝丽涵、王美山*

鲁东大学物理与光电工程学院, 山东, 烟台, 邮编, 264025

*Email: mwang1971@163.com

摘要: 高分辨分子振转光谱是洞察分子内部结构、运动规律以及物化特性的窗口, 是研究分子结构与性能的重要手段。对于天体物理、大气物理、激光物理等方面的研究有着重要的意义。

F₂SO 是 SF₆ 的一种重要的降解产物, 其气相光谱表征最近受到关注。SF₆ 具有良好的灭弧特性, 被广泛用作开关设备的绝缘体。SF₆ 气体在发生局部放电、火花等情况下会分解成 SF₄、SF₃、SF₂ 等低氟硫化物。这些低氟硫化物化学性质非常活泼, 与 SF₆ 中的 H₂O、O₂ 杂质发生反应生成 F₄SO、F₂SO、F₂SO₂。F₂SO 与 H₂O 进一步反应可生成 SO₂、HF 等强腐蚀性气体。这些气体释放到空气中会污染环境, 造成全球变暖。除此之外, SF₆ 在等离子体蚀刻工艺中还有着重要的应用。

基于密度泛函理论(DFT)中的 B3LYP、B3P86、B3PW91 以及二阶微扰(MP2)方法结合 Dunning 相关一致基组(cc-pvqz、cc-pv5z、aug-cc-pvqz、aug-cc-pv5z)计算了基态 F₂SO 分子的平衡几何结构、平衡转动常数、基态转动常数、基频和谐频。同时, 预测了 F₂SO 分子在实验上尚未观测的一系列光谱常数(如: 非谐性常数、离心畸变常数、科里奥利耦合常数等)。

关键词: 非谐振力场 光谱常数 平衡几何结构 从头算 F₂SO

参考文献

- [1] Y.L. Zhao, M.S. Wang, C.L. Yang, X.G. Ma, Z.L. Zhu, Spectrochim. Acta A 164 (2016) 89-92.

资助项目

该工作得到了中国国家自然科学基金项目(基金号: 11474142)和山东省自然科学基金项目(ZR2014AM005)的资助, 在此表示衷心的感谢!

带电粒子作用下碳氢分子中 H₃⁺离子的形成机制

张煜 1、杨传路 2、于皖东 1、魏龙 1、王博 1、闫冰 3、邹亚明 1、陈力 1、魏宝仁 1
1 复旦大学现代物理研究所、核物理与离子束应用教育部重点实验室, 上海, 200433。

2 鲁东大学物理与光电工程学院, 烟台, 264025。

3 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春, 130012

Email: brwei@fudan.edu.cn

摘要: H₃⁺离子因其基本性质、天文学意义及丰富的动力学信息而引起人们的极大兴趣[1]。在星际化学中, 它可以将其多余的质子提供给其他中性的原子或分子[2, 3]。这些质子化的原子或分子可继续引发化学反应, 生成复杂分子。实验室研究中发现: 在电子、离子碰撞或光电离后, 双电荷有机分子可碎裂产生 H₃⁺离子。但是长久以来人们对上述分子二价离子产生 H₃⁺离子的机制并不清楚。本工作选择带电粒子与碳氢小分子碰撞, 研究 H₃⁺的形成机制。这些碰撞过程一方面真实地存在于天体环境中, 另一方面也促使我们寻找新的实验和理论分析方法。本工作基于冷靶反冲离子动量谱仪 (Cold target recoil ion momentum spectroscopy) [4], 测量了 300 eV 电子、3 keV/u Ar⁸⁺离子作用下三种碳氢分子 (甲烷、乙烯、乙烷) 产生的 H₃⁺通道的 KER 分布, 结合量子化学计算得到反应路径、识别过渡态, 以研究 H₃⁺离子的形成机制。实验所测平均 KER 与理论计算所得反向活化能很好符合, 这表明形成 H₃⁺离子 (包括分子的结构重组和 H₂ roaming 过程) 的时间足够长, 使得分子离子的多余能量可重新分配给产物的各个内能自由度。本工作中三种碳氢分子具有不同的官能团, 即甲基、碳碳单键及双键, 因此本工作所揭示的 H₃⁺离子形成机制有助于理解其他复杂有机分子产生 H₃⁺离子。

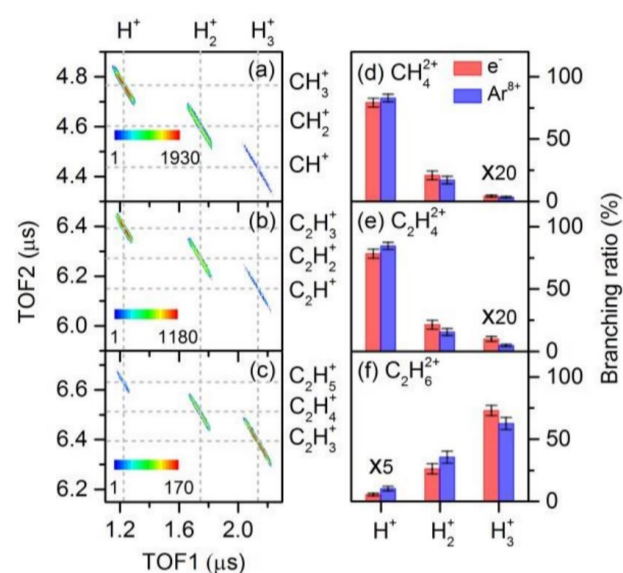


图 1 CH₄²⁺、C₂H₄²⁺及 C₂H₆²⁺离子解离为 H_n⁺ (n=1-3) 的两体碎裂通道的(a)飞行时间符合及(b)分支比

关键词: H₃⁺, 高电荷态离子、质子迁移

参考文献:

[1] J. Tennyson, Rep. Prog. Phys. 57, 421 (1995).

[2] M. Larsson, Int. J. Astrobiol. 7, 237 (2008).

[3] T. Oka, Chem. Rev. 113, 8738 (2013).

[4] Y. Zhang, X. Wang, D. Lu, B. Wei, et al, Nucl. Instr. And Meth. B 337, 39 (2014).