**项目公示信息**

**一、项目名称**：极端条件下原子分子复杂动力学的理论研究

**二、主要完成人情况：**

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 姓名 | 排名 | 行政职务 | 技术职称 | 工作单位 | 完成单位 | 主要贡献 |
| 陈彦军 | 1 | 无 | 教授 | 陕西师范大学 | 陕西师范大学 | 负责项目的总体设计并指导超强激光场中原子分子复杂动力学和非线性效应的研究。设计研究强场分子高次谐波辐射和电离动力学。 |
| 栗生长 | 2 | 教工党支部书记 | 副教授 | 西安交通大学 | 西安交通大学 | 协助进行项目的策划与完成，指导超低温下原子分子复杂动力学和非线性效应的研究。设计研究超冷原子分子绝热动力学及调控。 |
| 赵立臣 | 3 | 无 | 副教授 | 西北大学 | 西北大学 | 设计指导基于高阶非线性薛定谔方程描述的复杂动力学研究。参与超冷原子分子绝热动力学及调控的研究。 |
| 辛国国 | 4 | 无 | 讲师 | 西北大学 | 西北大学 | 参与基于高阶非线性薛定谔方程描述的复杂动力学研究。 |
| 杨战营 | 5 | 物理学院副院长 | 教授 | 西北大学 | 西北大学 | 参与基于高阶非线性薛定谔方程描述的复杂动力学研究。 |
| 于术娟 | 6 | 无 | 无 | 无 | 陕西师范大学 | 参与强激光场中不对称分子奇偶谐波辐射的研究。 |
| 王赏 | 7 | 无 | 无 | 无 | 陕西师范大学 | 参与强激光场中分子双电离的研究。 |
| 李雁鹏 | 8 | 无 | 无 | 无 | 陕西师范大学 | 参与强激光场中分子谐波辐射效率的研究。 |

**三、完成人合作关系说明**

1.陈彦军/1、于术娟/6、李雁鹏/8合作发表论文2、17

2.陈彦军/1、于术娟/6、王赏/7合作发表论文3、11

3.陈彦军/1、于术娟/6合作发表论文4

4.陈彦军/1、王赏/7合作发表论文5

5.栗生长/2、赵立臣/3合作发表论文8、10、14、18

6.赵立臣/3、辛国国/4、杨战营/5合作发表论文9

7.赵立臣/3、杨战营/5合作发表论文12、13、20

8.陈彦军/1、栗生长/2、赵立臣/3、辛国国/4、杨战营/5、于术娟/6、王赏/7共同获得陕西省高等学校科学技术奖一等奖。

**四、主要完成单位排序及贡献：**

1.陕西师范大学。作为本项目的依托单位，陕西师范大学为项目的顺利完成并取得优异成绩做出了突出贡献，主要表现为：1）组织并完成了项目策划和实施工作；2）具体完成了强场分子高次谐波辐射和电离等复杂非线性现象的研究，取得了一些突破性进展，如建立的不对称分子奇偶谐波辐射理论在相关实验研究中展示了重要的应用，提出的极性分子振动激发机制为国际著名实验组所验证。

2.西安交通大学。作为本项目的合作单位，西安交通大学为项目的顺利完成并取得优异成绩做出了重要贡献，主要表现为：1）参与了项目的策划和实施工作；2）具体完成了超冷原子分子系统绝热动力学及量子调控的研究，取得了系列重要进展，如建立了绝热几何相位和量子相变之间的联系，提出了控制量子相变的动力学方法，预言了非球对称分布的虚拟磁单极场等。

3.西北大学。作为本项目的合作单位，西北大学为项目的顺利完成并取得优异成绩做出了重要贡献，主要表现为：1）参与了项目策划和实施工作；2）具体完成了基于高阶非线性薛定谔方程研究复杂系统动力学的工作，取得了系列重要进展，如系统地探讨了奇异非线性波的激发机制及其动力学控制等问题。

**五、完成单位合作关系说明：**

极端条件下原子分子动力学涉及一系列复杂的非线性现象，为顺利完成该课题，项目完成单位之间分工合作，其中陕西师范大学负责超强激光场原子分子动力学的研究，西安交通大学负责超低温原子分子动力学的研究，西北大学负责可用非线性薛定谔方程描述的其他复杂系统动力学的研究。

**六、项目简介：**

极端条件下原子分子复杂动力学过程在阿秒科学和量子调控中具有重要应用，是科技部和国家基金委十三五规划重点支持的研究课题之一。近年来，实验上对原子分子本身的精确操控手段和对其动力学行为的调控技术都取得了长足的进步，新的实验现象不断被报道。一方面，这些新的实验结果需要完善的理论对其做出物理解释；另一方面，深入的理论研究也可以做出一些重要的预言待实验验证。

本项目以上述两个方面为出发点，重点对超强激光和超低温度等极端条件下原子分子的复杂动力学行为进行理论研究。主要研究内容和科学发现点如下：

（1）不对称分子奇偶谐波辐射特性及其应用。提出了将不对称分子奇次和偶次谐波辐射分别独立研究的思路，发现了奇偶谐波辐射在频域上的不同特性，建立了奇偶谐波辐射理论模型；并进一步将该理论模型应用到了不对称分子轨道成像、探测不对称分子瞬时结构、追踪不对称分子核的动力学等超快探测领域。

（2）极性分子强场电离动力学。研究了极性分子强场电离过程中的固有偶极子效应，揭示了固有偶极子对电离的重要影响，提出了利用超短脉冲下谐波辐射标定极性较强的不对称分子取向度的方案；发现了外场中分子快速拉伸的新通道，即异核分子固有偶极子运动导致的直接振动激发，为建立强场分子动力学的异核极限奠定了基础。

（3）对称分子谐波辐射和电离的机制。研究了对称分子非次序双电离取向效应，揭示了分子结构在非次序双电离过程中的作用；研究了对称分子阈下谐波的辐射特性，揭示了分子轨道对称性对阈下谐波产量和极化率的重要影响；研究了分子谐波产量与激光波长的关系，揭示了分子结构和取向效应对谐波产量的重要影响。

（4）超冷原子-分子耦合系统的量子相变和动力学调制。研究了基态几何相位在相变临界点的不连续跳跃行为，得到了相变临界点和相变特征标度律，提出了利用周期调制对原子-分子混合动力学和量子相变进行有效控制的动力学手段。

（5）超冷原子-分子耦合系统的绝热动力学和虚拟磁单极。研究了不对称性和粒子间非线性相互作用对系统绝热动力学特性的影响，发现了非球对称性分布的虚拟磁单极场，揭示了磁荷跟能级简并和系统尺寸以及不对称性之间的联系。

（6）玻色-爱因斯坦凝聚体中非线性波的激发、碰撞和干涉。研究了原子间相互作用和外部势场对各种类型非线性波的产生、碰撞及干涉的影响，揭示了波传播中出现类似于“呼吸子”动力学行为的内在机制，并提出了有效控制其传播的动力学手段。

以上研究和发现具有重要的理论和实践价值。前三点重点探讨超强激光场中原子分子的微观动力学机制，相关工作对深入理解电离和高次谐波辐射等强场超快过程的物理机制具有重要意义，并为这些超快过程在阿秒科学中的应用奠定了基础。后三点重点探讨超低温下相干原子分子的宏观动力学规律，相关工作对深入理解非线性波的产生机制和传播行为具有重要意义，并为相干调控和几何相位在精密测量中的应用提供了依据。

这些研究工作得到了国家自然科学基金面上项目和青年项目以及中央高校基本科研业务费特别支持项目的资助。取得的主要理论成果发表在《Physical Review Letters》、《Physical Review A》、《Physical Review E》和《Optics Express》等权威学术期刊上，共20篇。

后来发表在《Science》等顶级期刊上的相关实验工作中广泛使用的不对称分子奇偶谐波辐射模型和本项目中建立的奇偶谐波辐射理论模型一致；本项目中提出的极性分子振动激发通道已被国际著名实验组所验证；本项目部分理论成果还被《Physical Review Letters》、《Science Advances》等顶级期刊文章正面引用。论文总引用188次，其中他引97次。

**七、主要论文专著目录和主要知识产权证明目录（见目录列表）：**

**八、客观评价：**

本项目在奇偶高次谐波光谱学、极性分子强场电离动力学和对称分子谐波辐射机制研究方面取得了系列原创性研究成果；建立的奇偶谐波辐射理论已经在实验研究中展示了重要的应用、发现的极性分子振动激发通道已被国际著名实验组所验证，关于对称分子谐波效率的研究得到了后来相关理论研究工作的重点引用。详述如下：

（1）先前人们研究不对称分子谐波辐射时通常将奇偶谐波辐射作为整体来研究。本项目将奇次和偶次谐波辐射分开独立研究，发现了奇偶谐波辐射在频域的不同特性，建立了描述不对称分子奇偶谐波辐射的理论模型，揭示了分子结构对奇偶谐波相对产量的重要影响，并进一步将该理论模型应用到超快探测领域**[Phys. Rev. Lett. 111, 073902 (2013)]**。相关研究为利用奇偶谐波辐射探测不对称分子电子结构和超快动力学的实验研究奠定了理论基础。

**事实上，后来实验研究中[Science 350,790 (2015); Phys. Rev. Lett. 113, 023001 (2014); J. Phys. B 47, 124030 (2014)]广泛使用的不对称分子****奇****偶谐波辐射模型与本项目中建立的理论模型一致；由本项目中建立的理论模型在考虑实验因素(取向平均)后推导出的奇偶谐波辐射理论公式[****Phys. Rev. A 96, 013432 (2017)]和上述实验研究中采用的公式具有相同的形式。**

（2）先前人们已知激光将导致对称分子电子态之间的耦合(电子激发通道)，进而引起分子拉伸。本项目首次对不对称分子HeH+在强激光场中的动力学进行了理论研究，发现由于固有偶极子导致的核的振动态之间的直接耦合(直接振动激发通道)，在外场中HeH+将在飞秒时间尺度内快速拉伸**[Phys. Rev. A 94, 053407 (2016)]**。这与对称分子(例如H2)在强激光场中的拉伸机制迥异。极性分子直接振动激发通道的发现为建立强场分子动力学的异核极限奠定了基础。

**基于上述理论工作，强场领域著名专家**[**G. G. Paulus**](https://arxiv.org/find/physics/1/au%3A%2BPaulus_G/0/1/0/all/0/1)**领导的小组从实验上详细研究了HeH+在强激光场中的非电离解离、单电离和双电离动力学[arXiv:1801.04831 (2018)]。他们发现直接振动激发通道在HeH+的上述过程中都具有主导地位，进而给出了强场电离的异核极限，建立起了从对称分子到不对称分子的更加完整的强场分子动力学物理图像。这对人们理解极性分子在强场中的动力学具有非常重要的意义，例如CO分子，其动力学性质将介于最简单的对称分子H2+和最不对称的异核分子HeH+之间。**

（3）高次谐波辐射的重要应用之一是产生阿秒脉冲，这就需要充分研究谐波辐射效率。先前人们已经广泛研究了强激光场中原子高次谐波辐射的效率。本项目首次研究了分子谐波辐射的效率，揭示了分子谐波产量与分子结构以及分子取向的内在联系，并进一步深入讨论了激光波长对分子谐波产量的影响**[J. Phys. B 49, 075603 (2016)]**。相关研究为利用分子谐波辐射产生阿秒脉冲的实验研究提供了重要理论依据。

**在关于二维材料谐波辐射的理论研究工作中[Sci. Adv. 4, eaao5207 (2018)]，纳米领域国际著名专家A. Rubio和合作者引用了一些代表性论文(共七篇)以介绍先前人们对原子或分子谐波辐射效率的研究，本项目中的上述研究工作是唯一被引用的关于分子谐波辐射效率的论文。**

**九、知情同意证明（见附件）**

**十、科学意义和价值：**

本项目中对极端条件下原子分子复杂动力学研究取得的相关研究成果在阿秒科学、化学反应、量子计算和精密测量中具有重要的应用价值。本项目中发展的求解非线性薛定谔方程的解析方法还对研究极端条件下复杂系统的动力学行为具有重要的学术价值。详述如下。

（1）本项目中建立的奇偶谐波辐射理论模型在基于高次谐波辐射的超快测量领域具有重要应用，可用于解释相关实验现象和构建新的超快探测方案，例如不对称分子轨道成像方案和不对称分子取向度标定方案等。

（2）本项目中发现的极性分子振动激发通道对理解极性分子在强激光场中的动力学具有重要的意义，极大地促进了相关实验研究，为建立从对称分子到不对称分子的强场分子动力学完整物理图像奠定了理论基础。

（3）本项目中对分子谐波辐射效率的研究深化了人们对分子谐波辐射取向效应和波长依赖的认识，促进了相关领域理论研究的深入发展，为利用分子谐波辐射产生阿秒脉冲的相关实验研究提供了重要理论依据。

（4）本项目建立的超冷玻色原子-分子耦合系统量子相变和基态几何相位之间的联系，丰富了对量子相变进行精确描述的理论方法；得到的两条相变特征标度律，为此类系统量子相变的分类提供了理论依据；提出的利用周期调制对量子相变进行控制的理论，拓宽了周期动力学调控手段的应用范围。

（5）本项目发现的超冷原子-分子耦合系统的奇异虚拟磁单极场，深化了人们对系统不对称性和多体相互作用重要性的认识，丰富了此类系统虚拟磁单极场的现有理论，该研究为在实验上产生任意磁荷的虚拟磁单极提供了坚实的理论基础。

（6）本项目中发展的求解非线性薛定谔方程的解析方法对研究极端条件下复杂系统的动力学行为具有重要的学术价值。特别为揭示玻色-爱因斯坦凝聚体中奇异物质波的激发机制、控制物质波的碰撞行为和分析物质波的干涉特性等提供了重要的理论工具。

**主要论文专著目录（限20条）**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 论文专著名称 | 刊名 | 作者 | 影响因子 | 年卷页码（xx年xx卷xx页） | 发表时间 | 通讯作者 | 第一作者 | 国内作者 | SCI他引次数 | 他引总次数 | 知识产权是否归国内所有 |
| 1 | Asymmetric molecular imaging through decoding odd-even high-order harmonics | Physical Review Letters | Y. J Chen, L. B. Fu, and J. Liu | 8.462 | 2013年111卷073902-1到073902-5页 | 2013年8月 | 陈彦军 | 陈彦军 | 陈彦军，傅立斌，刘杰 | 17 | 17 | 是 |
| 2 | Ellipticity of odd-even harmonics from oriented asymmetric molecules in strong linearly polarized laser fields | Physical Review A | S. J. Yu, B. Zhang, Y. P. Li, S. P. Yang and Y. J. Chen | 2.925 | 2014年90卷053844-1到053884-8页 | 2014年11月 | 陈彦军，张冰 | 于术娟 | 于术娟，张冰，李雁鹏，杨世平，陈彦军 | 0 | 0 | 是 |
| 3 | Probing nuclear dynamics of oriented HeH+ with odd-even high-order harmonics | Physical Review A | W. Y. Li, S. J. Yu, S. Wang and Y.J. Chen | 2.925 | 2016年94卷053407-1到053407-10页 | 2016年11月 | 陈彦军 | 李卫艳 | 李卫艳，于术娟，王赏，陈彦军 | 0 | 0 | 是 |
| 4 | Probing degrees of orientation of polar molecules with harmonic emission in ultrashort laser pulses | Physical Review A | Y. Z. Shi, B. Zhang, W. Y. Li ,S. J. Yu and Y. J. Chen | 2.925 | 2017年95卷033406-1到033406-9页 | 2017年3月 | 陈彦军，李卫艳 | 史英哲 | 史英哲，张冰，李卫艳，于术娟，陈彦军 | 0 | 0 | 是 |
| 5 | Attosecond double-ionization dynamics of aligned H2: Two-dimensional quantum simulations | Physical Review A | S. Wang and Y. J. Chen | 2.925 | 2015年90卷023418-1到023418-8页 | 2015年8月 | 陈彦军 | 王赏 | 王赏，陈彦军 | 0 | 0 | 是 |
| 6 | Quantum phase transition in a three-level atom-molecule system | Physical Review A | S. C. Li, L. B. Fu and F. L. Li | 2.925 | 2013年88卷013602-1到013602-7页 | 2013年7月 | 栗生长 | 栗生长 | 栗生长，傅立斌，李福利 | 2 | 2 | 是 |
| 7 | Virtual monopoles in a bosonic atom–diatomic-molecule system | Physical Review A | S. C. Li, L. B. Fu and J. Liu | 2.925 | 2014年89卷023628-1到023628-6页 | 2014年2月 | 栗生长 | 栗生长 | 栗生长，傅立斌，刘杰 | 1 | 1 | 是 |
| 8 | Rational W-shaped solitons on a continuous-wave background in the Sasa-Satsuma equation | Physical Review E | L. C. Zhao, S.C. Li and L.M. Ling | 2.366 | 2014年89卷023210-1到023210-6页 | 2014年2月 | 栗生长，凌黎明 | 赵立臣 | 赵立臣，栗生长，凌黎明 | 17 | 17 | 是 |
| 9 | Rogue-wave pattern transition induced by relative frequency | Physical Review E | L. C. Zhao, G. G. Xin and Z. Y. Yang | 2.366 | 2014年90卷022918-1到022918-6页 | 2014年8月 | 赵立臣 | 赵立臣 | 赵立臣，辛国国，杨战营 | 11 | 11 | 是 |
| 10 | W-shaped solitons generated from a weak modulation in the Sasa-Satsuma equation | Physical Review E | L. C. Zhao, S. C. Li, and L. M. Ling | 2.366 | 2016年93卷032215-1到032215-8 页 | 2016年3月 | 凌黎明 | 赵立臣 | 赵立臣，栗生长，凌黎明 | 2 | 2 | 是 |
| 11 | Polarization properties of below-threshold harmonics from aligned molecules H2+ in linearly polarized laserfields | Optics Express | F. L. Dong, Y. Q. Tian, S. J. Yu, S. Wang, S. P. Yang and Y. J. Chen | 3.307 | 2015年23卷 18106-18116页 | 2015年7月 | 陈彦军 | 董福龙 | 董福龙，田轶群，于术娟，王赏，杨世平，陈彦军 | 3 | 3 | 是 |
| 12 | The rogue waves with quintic nonlinearity and nonlinear dispersion effects in nonlinear optical fibers | Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation | L. C. Zhao, C. Liu and Z. Y. Yang | 2.784 | 2015年20卷9-13 页 | 2014年4月 | 赵立臣，杨战营 | [赵立臣](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1007570414001646) | 赵立臣，刘冲，杨战营 | 11 | 11 | 是 |
| 13 | Pair-tunneling induced localized waves in a vector nonlinear Schroinger equation | Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation | L.C. Zhao, L.M. Ling, Z.Y. Yang, J. Liu | 2.784 | 2015年23卷21-27 页 | 2015年10月 | 赵立臣 | 赵立臣 | 赵立臣，凌黎明，杨战营，刘杰 | 3 | 3 | 是 |
| 14 | Role of asymmetry in the geometric phase of a coupled atom-heteronuclear molecule system | Europhysics Letters | S. C. Li and L. C. Zhao | 1.957 | 2013年104卷66002-1到66002-6页 | 2014年1月 | 栗生长 | 栗生长 | 栗生长，赵立臣 | 0 | 0 | 是 |
| 15 | Matter-wave interactions in two-component Bose-Einstein condensates | Europhysics Letters | S. C. Li and F. Q. Dou | 1.957 | 2015年111卷30005-1到30005-6页 | 2015年8月 | 栗生长 | 栗生长 | 栗生长，豆福全 | 2 | 2 | 是 |
| 16 | Magnetosonic waves interactions in a spin-1/2 degenerate quantum plasma | Physics of Plasmas | S. C. Li and J. N. Han | 2.115 | 2014年21卷032105-1到032105-8页 | 2014年3月 | 栗生长 | 栗生长 | 栗生长，韩久宁 | 14 | 14 | 是 |
| 17 | Wavelength dependence of high-harmonic yield from aligned molecules: roles of structure and electron dynamics | Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics | Y. P. Li, S. J. Yu, X. Y. Duan, Ying- Zhe Shi and Y. J. Chen | 1.792 | 2016年49卷075603-1到075603-10页 | 2016年3月 | 陈彦军 | 李雁鹏 | 李雁鹏，于术娟，段晓娅，史英哲，陈彦军 | 2 | 2 | 是 |
| 18 | Periodic modulation effects on phase transitions in an ultracold atom-molecule system | Journal of the Optical Society of America B | S. C. Li and L. C. Zhao | 1.843 | 2014年31卷642-647页 | 2014年2月 | 栗生长 | 栗生长 | 栗生长，赵立臣 | 1 | 1 | 是 |
| 19 | Quantitative relations between modulational instability and several well-known nonlinear excitations | Journal of the Optical Society of America B | L. C. Zhao and L. M. Ling | 1.843 | 2016年33卷850-856 页 | 2016年4月 | 凌黎明 | 赵立臣 | 赵立臣，凌黎明 | 7 | 7 | 是 |
| 20 | Localized Waves on Continuous Wave Background in a Two-Mode Nonlinear Fiber with High-Order Effects | Journal of the Physical Society of Japan | L. C. Zhao, Z. Y. Yang, and L. M. Ling | 1.45 | 2014年83卷104401-1到105501-7页 | 2014年9月 | 赵立臣，凌黎明 | 赵立臣 | 赵立臣，杨战营，凌黎明 | 4 | 4 | 是 |
| 合计 | 97 | 97 |  |
| 补充说明 |