

甘肃省大学生创新创业训练计划
项目申报表
(创新训练项目)

推荐学校：西北师范大学 (盖章)

项目名称：原子结构及动力学性质的研究

所属一级学科名称：物理学类

项目负责人：邓疆

联系电话：18809401706

指导教师：颀录有

联系电话：13993192886

申报日期：2019年4月25日

甘肃省教育厅 制

项目名称		原子结构及动力学性质的研究					
项目所属一级学科		物理学类					
项目实施时间		起始时间： 2018 年 11 月 完成时间： 2019 年 11 月					
项目简介 (100字以内)	利用相对论组态相互作用和相对论扭曲波理论方法和相关程序，开展高电荷态离子碰撞激发、双电子复合和辐射复合过程的研究，为天体物理、实验室及热核聚变等离子体的状态诊断、光谱模拟和应用研究等提供理论支持。						
申请人或申请团队		姓名	年级	学号	所在院系/专业	联系电话	E-mail
	主持人	邓疆	16级	201642010107	物理与电子工程学院 物理学	18809401706	3276465616@qq.com
		路思梅	17级	2017211786	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18809405269	1120804082@qq.com
	成员	程小淑	16级	2016211406	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18419066239	2561129023@qq.com
		袁肖肖	16级	2016211412	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18393918732	280109199992@qq.com
		张俊明	17级	2017211778	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18809461513	1900153538@qq.com
		赵吉宁	17级	2017211785	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18809461462	365107503@qq.com
		潘建平	18级	2018211871	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18119480350	1535862975@qq.com
		张芳军	18级	2018211853	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18193434693	1596767215@qq.com
		乃国伟	18级	2018211854	物理与电子工程学院 原子与分子物理	18983422214	1391771314@qq.com
		宋小刚	16级	201675010229	物理与电子工程学院 物理学	18419065996	1953165576@qq.com
		高敏	16级	201672010209	物理与电子工程学院 物理学	15693310697	1374561651@qq.com
雷秉艳		16级	201672010215	物理与电子工程学院 物理学	15002514269	1350150324@qq.com	

		贾梦媛	16 级	201672 010213	物理与电子工程学院 物理学	15117273 135	2750845068 @qq.com	
		赵阳阳	17 级	201772 010130	物理与电子工程学院 物理学	13369341 973	3509172920 @qq.com	
指 导 教 师	第一 指导 教师	姓名	颀录有		单位	物理与电子工程学院		
		年龄	44		专业技术职务	副教授		
	主要成果		<p>颀录有，副教授。主要从事原子（离子）结构与光谱、电子与原子（离子）碰撞及光与原子（离子）相互作用动力学过程等的研究，主持完成国家自然科学基金 2 项，甘肃省高校科研业务费项目 1 项，参与完成国家自然科学基金项目 6 项，中-爱国际合作研究项目 1 项，发表 SCI 论文 50 余篇，研究成果获省自然科学二、三等奖各 1 项，省高校科技进步一等奖 3 项，二等奖 2 项。长期主讲《原子物理学》、《光学》、《热力学与统计物理》、《线性代数》、《原子碰撞理论》等本科生和研究生的课程。</p>					
	第二 指导 教师	姓名	张登红		单位	物理与电子工程学院		
		年龄	44		专业技术职务	副教授/院长		
主要成果		<p>张登红，副教授。主要从事高电荷态离子的结构、衰变性质以及碰撞动力学过程的研究。发表学术论文 30 余篇。主持国家自然科学基金 2 项，合作主持国家自然科学基金联合基金项目 1 项，完成甘肃省自然科学基金项目 1 项，西北师范大学青年教师科研能力提升计划重点项目 1 项，参与完成国家自然科学基金项目 2 项。研究成果获甘肃省自然科学奖三等奖 1 项，甘肃省高校科技进步一等奖 1 项，二等奖 1 项。曾于 2006 年 3 月在爱尔兰著名学府都柏林大学进行了为期 3 个月的交流访问，2013 年在韩国原子能研究院做博士后研究工作。</p>						
<p>一、申请理由（包括自身具备的知识条件、自己的特长、兴趣、已有的实践创新成果等）</p> <p>我是一名大三学生，同时也是原子世界探幽这个创新团队的成员。通过在这个团队里面的学习和老师以及师兄师姐的指导，我和团队成员已基本掌握开展高电荷态离子动力学过程研究的基本理论方法并参与了程序发展、数据计算以及结果分析，已具备较强的计算能力和独立思考能力，我们对原子与分子物理有着浓厚的兴趣。因此，我们认为自己有能力完成该项目。</p>								

二、项目方案

具体内容包括：

2.1 项目研究背景（国内外的研究现状及研究意义、项目已有的基础，与本项目有关的研究积累和已取得的成绩，已具备的条件，尚缺少的条件及方法等）

电子与高电荷态离子的碰撞激发和双电子复合、辐射复合过程一直是原子结构和碰撞动力学研究领域的热点问题。其中电子与离子的碰撞激发（EIE）是电子与离子碰撞中最常见的非弹性散射过程之一。其主要包括直接碰撞激发和间接碰撞激发，直接碰撞激发是指具有一定能量的自由电子与离子发生碰撞；当自由电子的能量 E 大于等于激发阈值时，离子吸收能量从初态跃迁到末态称为直接碰撞激发。双电子复合（DR）过程是指离子俘获一个自由电子的同时，释放一个或多个光子的过程。双电子复合是电子-离子碰撞中发生的共振辐射复合过程，是等离子体中的一种非常重要的原子过程，尤其对热等离子体中的电荷态布居和所产生的 X 射线谱都有着重要影响，而且此过程中所产生的双电子伴线已成为等离子体温度诊断的重要手段[1]。双电子复合截面的高分辨测量已被广泛应用于强库仑场中 QED 效应的精确研究、全相对论碰撞理论的检验、原子中电子与核之间相互作用的高阶效应的研究、以及提供天体物理学和聚变等离子体物理相关的绝对复合速率系数等诸多方面。对于双电子复合过程的研究，不仅有助于发展和检验原子结构理论、揭示复杂原子（或离子）的结构及其动力学特性，而且对等离子体温度密度的精确诊断、天体光谱的模拟和受控核聚变的应用研究都具有十分重要的理论价值和实际意义。

近年来，随着高能加速器的冷却储存环、电子束离子阱（EBIT）、同步辐射光源以及超强、超快激光技术的发展，电子与原子、离子，特别是复杂重原子及高离化态离子（HCI）碰撞动力学性质的实验研究取得了重要进展[2-6]。实验上人们已经能够获得高精度的电子与高电荷态离子碰撞激发及双电子复合过程的中间态强度、截面和速率系数等，从而得出高分辨的电子碰撞激发和双电子复合的辐射谱、各向异性和极化性质等。近年来，我们团队在相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论方法及计算程序 GRASP92 的基础上，开展了研究电子与离子辐射复合和双电子复合过程程序 RERR06 和 REDR05 的编写。这套程序不仅可以处理复杂原子离子的电子关联效应，而且可以很好的处理动力学过程中的弛豫、Breit 相互作用等。利用这套程序，我们系统研究了高电荷态 Hg 离子和 U 离子的双电子复合过程，讨论了 Breit 效应和 QED 效应对离子共振双激发态的贡献；其中有关类氦到类铍 I 离子的双电子复合过程的研究成功地解释了日本东京 EBIT 上测量的双电子复合谱；另外，我们研究了 He-like $2s2$ 和 Li-like $1s2s2$ 的内壳层激发态的退激发过程沿等电子系列的变化规律。相关结果引起了国际同行的关注，特别是对 U89+ 离子 $1s2s2$ 态的两电子一光子跃迁，已经被德国 GSI 的实验所证实；而类氦至类氧 Xe 离子的双电子复合谱也与上海 EBIT 的实验谱完全复合。近来我们对相关程序做了进一步的修改和完善，初步发展了计算磁子能级俘获截面的新程序，已经开展了对类 H 和类 Li 离子双电子复合过程中的角分布和极化特性的研究。

本项研究将在我们前期已完成工作[7-11]的

基础上，通过考虑相对论效应、电子关联效应和 Breit 相互作用，来系统研究天体物理中高丰度元素 S、Si、Fe、Ar、Ti、Ni、Xe、等的重要物理意义，以热核聚变研

究中十分关注的 W、Au 等元素的高电荷态离子的电子碰撞动力学过程，发展基于相对论扭曲波理论方法的计算电子碰撞激发、双电子复合和辐射复合过程的相关程序，能够准确计算电子碰撞激发过程的强度、截面和速率系数，双电子复合过程的强度、截面和速率系数，以及辐射光子的角分布和极化度。同时，计算高电荷态离子等电子系列离子双电子复合过程的共振强度，总结等电子系列强度变化规律和相对论效应的影响。研究相对论效应、电子关联效应、量子电动力学 (QED) 的影响，为实验研究和应用研究提供高精度的原子数据。这些研究符合当前国际前沿理论研究发展的需要，项目的开展对提高我国在该领域的理论研究水平，以及为实验和高技术领域的应用研究服务都有重要的意义。

- [1] H.W.Drawin, Phys.Reports. 37,125(1978).
- [2] J. R. Henderson, P.Beiersdorfer, C.L.Bennett, et al., Phys. Rev. Lett. 65, 705 (1990).
- [3] P. Beiersdorfer, D.A.Vogel, K.J.Reed, et al., Phys. Rev. A 53, 3974 (1996).
- [4] E. Takacs, E. S. Meyer, J. D. Gillaspy, and J. R. Roberts, Phys. Rev. A 54, 1342 (1996).
- [5] C. Brandau, C. Kozhuharov, Z. Harman, et al., Phys. Rev. Lett. 100, 073201 (2008).
- [6] Z. Harman, I. I. Tupitsyn, A. N. Artemyev, et al., Phys. Rev. A 73, 052711 (2006).
- [7] Lijun Dou, Luyou Xie, Denghong Zhang et al., Eur. Phys. J. D (2017) 71: 128.
- [8] L.Y.Xie et al., Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 141 (2014).
- [9] Li-Jun Dou, Lu-You Xie et al., Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 220 (2018).
- [10] 刘丽娟, 颜录有等, 物理学报 Acta Phys. Sin Vol. 61, NO. 10(2012), 103102.
- [11] Ma Xiao-Yun, Dong Chen-Zhong et al., Acta Physica Sinica, 61(21), 213401, (2012).

2.2 项目研究目标及主要内容研究目标:

首要目标是在国际上先进的研究原子结构和跃迁性质的相对论组态相互作用理论方法和计算程序 FAC 的基础上，发展能够系统研究电子与高电荷态离子碰撞激发

(EIE)、双电子复合 (DR)、辐射复合 (RR) 过程的相对论扭曲波理论方法和计算程序；继而为天体物理、热核聚变 (ICF, MCF) 及 X 射线激光以及国防领域的研究提供大量急需的高精度原子参数，为我国正在开展的高离化态离子的实验研究提供理论支持。

主要内容:

(1) 发展和建立研究高电荷态离子电子碰撞激发和双电子复合过程的光谱图、辐射跃迁性质和放出光子的极化特性的相关物理现象研究的理论方法和计算程序；

(2) 利用 FAC 程序，计算中性 Zn 原子、类硼 Fe 离子、类碳 Si 离子等高电荷态离子的 EIE 和 DR 过程的截面和速率系数，同时研究相对论效应、电子关联效应、Breit 相互作用、QED 效应以及原子核的效应对高离化态离子电子碰撞激发和双电子复合总截面、速率系数以及极化效应的影响；

(3) 计算等电子系列离子的强度、几率和截面，同时研究相对论效应对高电荷态动力学过程的影响；

计算 W、Au 等天体中高丰度离子的 DR 过程的 Auger 谱、辐射谱以及辐射光子的极化度，模拟实验结果。

2.3 项目创新特色概述

我们主要研究了天体中丰度较高的原子或离子的动力学过程，具体计算的电子碰撞激发过程的截面、速率系数，双电子复合过程的共振强度、截面和速率系数，以及辐射光子的角分布和极化度等一系列数据能为实验研究和应用研究提供高精度的原子数据，对等离子体温度密度的精确诊断、天体光谱的模拟和受控核聚变的应用研究具有重要的理论价值和实际意义，这些研究也填补了这些原子或离子研究的空缺。同时，研究相对论效应、电子关联效应、量子电动力学 (QED) 的影响。这些研究符合当前国际前沿理论研究发展的需要，项目的开展对提高我国在该领域的理论研究水平，以及为实验和高技术领域的应用研究服务都有重要的意义。

2.4 项目研究技术路线

(1) 计算中涉及了 EIE 和 DR 初、末态以及中间双激发态的大量组态，因此我们的理论方法是相对论组态相互作用；

(2) 对于大量的数据计算，我们使用目前国际上先进的数据计算程序 Flexible Atomic Code (FAC)；

(3) 计算中涉及了从低 Z 到高 Z 离子动力学过程的研究，相对论效应的影响随 Z 变化显著，因此我们也研究分析了这个效应对相关物理量的影响；

(4) 基于密度矩阵理论，我们将研究高 Z 多电子复杂原子体系的电子碰撞激发和光复合过程产生的退激辐射光谱的极化特性和角分布。

2.5 研究进度安排

文献查阅：	2018 年 11 月至 2019 年 10 月
发展程序：	2018 年 11 月至 2019 年 03 月
数据计算：	2019 年 03 月至 2019 年 06 月
数据处理：	2019 年 06 月至 2019 年 08 月
撰写论文或研究报告：	2019 年 08 月至 2019 年 09 月
结题和答辩：	2019 年 10 月至 2019 年 11 月
成果推广或论文发表：	2019 年 06 月至 2019 年 11 月

2.6 项目组成员分工

邓 疆：查阅文献

张俊明：查阅文献

雷秉艳：查阅文献

宋小刚：学习并发展新程序

赵吉宁：学习并发展新程序

高 敏：学习并发展新程序

潘建平：数据计算与处理

乃国伟：数据计算与处理

赵阳阳：数据计算与处理

张芳军：数据整理与分析

程小淑：数据整理与分析

路思梅：论文撰写
袁肖肖：论文撰写
贾梦媛：论文撰写

三、学校提供条件（包括项目开展所需的实验实训情况、配套经费、相关扶持政策等）

本项目的研究需要利用服务器在相对论组态相互作用理论方法和 FAC 程序的基础上开发新的程序并进行大量理论研究。实验室目前租赁的服务器有 2 台，计算机有 8 台。实验室有指导老师 2 名，硕士研究生 8 名，本科生 7 名，具备良好的科研条件和研究基础。

四、预期成果

课题研究成果主要以论文和会议摘要的形式发表，预期发表核心期刊以上论文 1-3 篇，提交国际会议摘要 1-4 个。

五、经费预算

总经费（元）	28000.00	财政拨款（元）	23000.00	学校拨款（元）	5000.00
--------	----------	---------	----------	---------	---------

注：总经费、财政拨款、学校拨款由学校按照有关规定核定数目进行填写

具体包括：

- 1、调研、差旅费 5000.00 元；
- 2、用于项目研发的服务器租赁费用和计算费用约 15000.00 元；
- 3、资料购置、打印、复印、印刷等费用 3000.00 元；
- 4、论文版面费及申请专利费共 5000.00 元。

六、导师推荐意见

该项目具有实际的研究意义，同时我们具备开展该项目的基础和条件，同意推荐。

签名：袁肖肖

2019年4月25日

七、院系推荐意见

同意推荐

院系负责人签名:

法非

学院盖章:



2019年4月26日

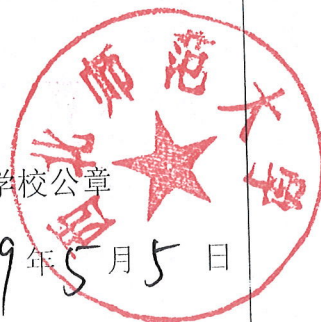
八、学校推荐意见:

同意推荐

学校负责人签名:



学校公章



2019年5月5日

注:表格栏高不够可增加。