

数据论文

$U^{q+}(q=3-92)$ 与 H 原子低能碰撞电荷转移过程研究^{*}

李晓筱¹⁾ 王瑜^{1)†} 王堃²⁾ 杨玉坤³⁾ 田亚莉¹⁾ 宫廷¹⁾ 郭古青¹⁾
和小虎¹⁾ 刘玲⁴⁾ 李传亮¹⁾ 吴勇⁴⁾ Svetlana A. Yakovleva⁵⁾
Andrey K. Belyaev⁵⁾

1) (太原科技大学, 应用科学学院, 山西太原 030024)

2) (山西大学, 环境科学学院, 山西太原 030006)

3) (河南师范大学, 物理学院, 河南新乡 453000)

4) (北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理全国重点实验室, 北京 100088)

5) (Department of Theoretical Physics and Astronomy, Herzen State Pedagogical University of Russia,
Petersburg 191186)

铀离子与氢原子碰撞的电荷转移截面及速率系数是千新星辐射输运建模、聚变等离子体诊断及重离子加速器束流设计的重要输入参数, 但迄今缺乏覆盖完整电离序列的系统理论研究。本文在多通道 Landau-Zener 理论框架下, 对 $U^{q+}(q=3-92)+H(1s)$ 单电子俘获过程的总截面与速率系数展开系统研究, 碰撞能量覆盖 0.001–1000 eV/u, 首次将铀的几乎完整电离序列纳入统一的理论框架。对于低电荷态 ($q \leq 12$), 截面在各自特征转折能量 E_t 以下近似遵循 E^{-1} 标度; 由于入射通道有效势垒的影响, 截面随能量升高呈现非单调变化, 且 E_t 随 q 增大而整体升高。对于 $q \geq 13$ 的高电荷态, 非单调转折在本文计算能区内基本消失, 截面在全能区近似保持 E^{-1} 标度行为。截面随电荷态的演化揭示了清晰的壳层调制规律: 每当铀离子电子组态从未满壳层过渡至满壳层或满半壳层时, 交换能稳定化使电离能异常偏高, 俘获截面相应出现极小值, 该对应关系在 $5d$ 、 $4f$ 、 $4d$ 、 $3d$ 等亚壳层的逐级剥离中均得到体现。经 Maxwell-Boltzmann 热平均获得 $1-10^5$ K 温度下的速率系数, 其温度依赖行为与截面的能量依赖规律相一致。本文结果可为上述领域的等离子体建模与束流设计提供系统理论参考数据。本文数据集可在<https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00235>中访问获取。

关键词: 电荷转移, 铀离子, 碰撞截面, 多通道 Landau-Zener 方法

PACS: 82.30.Fi, 82.20.Pm, 13.85.Fb

1 引言

铀 ($Z = 92$) 是自然界中最重的元素, 其离子序列涵盖从多价外层电子到类氢乃至裸核的极端量子体系, 在碰撞物理中具有独特的研究价值^[1,2]。铀离子与氢原子碰撞中的电荷转移截面及速率系数, 是等离子体物理、天体物理和重离子加速器等领域不可或缺的基础参数^[3-7]。然而, 与轻离子和中等质量元素相比, 铀离子与氢原子碰撞的系统性理论研究至今极度匮乏, 这一空白已成为多个前沿领域共同面临的瓶颈。

在天体物理方面, 2017 年探测到的双中子星并合引力波事件 GW170817 及其电磁对应体 AT2017gfo, 为 r -过程核合成提供了直接观测证据^[8]。AT2017gfo 的晚期近红外光变曲线被认为受高不透明度的重元素驱动, 其中锕系元素 (包括铀) 所贡献的极高束缚-束缚跃迁不透明度是关键因素^[9,10]。对千新星光谱与光变曲线的精确模拟, 不仅依赖于准确的原子结构信息, 同样取决于铀离子电荷态布居的动态演化, 而后者可能受到铀离子与周围中性粒子之间电荷转移过程的显著影响^[11,12]。在高能物理实验方面, 以 GSI/FAIR (德国) 和 FRIB (美国) 为代表的新一代大型重离子加速器设施均将铀束流加速列为核心科学任务^[13]。在 SIS18 和 SIS100 等同步加速器中, 铀离子束 (如 U^{28+}) 与本底残留气体 (H_2) 发生电荷交换, 导致束流粒子偏离设计磁刚度, 在色散元件后产生损失; 由此引发的离子诱导解吸附效应可使真空急剧恶化, 形成“动态真空”正反馈, 在数十圈内引发束流雪崩损失^[7,13]。准确可靠的铀离子电荷转移截面是评估束流寿命、优化加速器真空设计的必要输入参数。

从理论角度看, 铀-氢碰撞体系的处理面临多重挑战。在低能区 (≤ 1 keV/u), 碰撞速度远低于束缚电子速度, 量子隧穿和分子非绝热效应主导跃迁过程。全量子密耦合方法 (如原子或分子轨道强耦合方法) 虽

† 通信作者. E-mail: wangy@tyust.edu.cn

第一作者. E-mail: lxx@tyust.edu.cn

* 计算物理全国重点实验室基金 (批准号: 6142A05QN250106)、国家自然科学基金 (批准号: 12504297, 12204288, 12304279, 12274040)、国家重点研发计划 (批准号: 2022YFA1602504)、山西省外国专家项目 (批准号: 202504051012023)、山西省科技创新人才团队专项项目 (批准号: 202304051001034)、山西省来晋博士科研启动基金 (批准号: 20252011) 和太原科技大学校级博士科研启动基金 (批准号: 20242149) 资助的课题。

然精确，但受限于铀复杂的 $5f/6d$ 开壳层结构和密集的能级分布，所需的计算资源极为巨大^[14]；经典轨迹蒙特卡罗 (CTMC) 方法通常更适用于较高碰撞能量区，在低能区，由于量子隧穿、分子轨道耦合和非绝热效应更加重要，其适用性会受到限制^[15,16]。多通道 Landau-Zener (MCLZ) 方法将低能非绝热跃迁描述为分子势能曲线的“避免交叉”问题，在精度与效率之间取得了良好平衡。该方法由 Butler 和 Dalgarno^[17] 奠定基础，Janev 等^[18] 导出了多通道递归跃迁概率的严格表达式，Belyaev^[19] 在此基础上建立了多电子交换耦合的理论框架，并推导了非绝热区域多次穿越效应下多通道态-态跃迁概率的实用公式，将该方法的适用范围拓展至热能碰撞中的电荷转移与离子激发过程。此后，MCLZ 方法被广泛用于天体物理等离子体中高电荷态离子（如 C、N、Mg、Fe、Y 等）与氢原子碰撞截面的系统研究^[20-23]。Yakovleva 等^[24] 进一步将基于渐近方法的模型量子途径与 MCLZ 核动力学相结合，系统探究了低能 Be^+/Be 与 H/H^- 碰撞中的多种非弹性过程，为恒星大气非局部热动平衡建模提供了完整的原子参数，展示了该方法在轻离子-氢碰撞原子数据研究中的典型范式。

早期对铀离子电荷转移的研究主要集中于低电荷态和特定能量区间。针对 U^+ 等低电荷态，已有 100–1200 eV 能量范围内的对称电荷转移截面实验测量与理论分析，揭示了铀的对称电荷转移截面在低能端极小、随碰撞能量升高逐渐增大的特征^[25,26]。CTMC 方法由 Olson 和 Salop^[15] 发展用于中高能区 (≥ 10 keV/u) 多电荷态离子碰撞的理论描述，Fritsch 等^[14] 则系统评述了半经典紧耦合方法在多电荷态体系中的适用性与局限。对于高电荷态铀离子，Hess 等^[7] 在 GSI 的 SIS18 和 ESR 储存环中测定了 U^{28+} 在 10–180 MeV/u 能量范围内的束流寿命，并据此提取了与本底气体碰撞的电荷交换截面信息，但所涉及的能区远高于本文关注的低能范围，无法直接外推。总体而言，铀离子在低能区 (≤ 1 keV/u) 的电荷转移截面仍极度匮乏，现有工作仅覆盖少数低电荷态或孤立体系，尚缺乏贯穿完整电离序列的统一研究，铀离子逐级壳层剥离过程中电荷转移行为的物理规律亦有待揭示。

为填补上述空白，本文在统一的 MCLZ 理论框架下，对 U^{q+} ($q = 3-92$) 与氢原子低能碰撞 (0.001–1000 eV/u) 的单电子俘获过程



开展系统研究，旨在获取各电荷态的总电荷转移截面及速率系数，并揭示其随碰撞能量及电荷态演化的物理规律。

2 理论模型

本文在 MCLZ 理论框架下研究 U^{q+} 与 H 原子碰撞的单电子俘获过程。该方法将低能离子-原子碰撞视为准分子过程：当入射通道 ($U^{q+} + H$) 与出射通道 ($U^{(q-1)+} + H^+$) 对应的势能曲线在某一核间距处形成“避免交叉”时，电子经由非绝热跃迁实现从氢原子到铀离子的转移。该方法无需在低能区求解全量子散射方程，通过半经验耦合矩阵元即可较好地刻画非绝热跃迁的物理图像，已在多个离子-氢碰撞体系中得到广泛验证^[20–23]。

入射通道势能 $V_i(R)$ 描述 U^{q+} 与中性氢原子在核间距 R 处的相互作用，长程区由铀离子库仑场对氢原子电子云的极化吸引主导，短程区需引入排斥项以确保势能在 $R \rightarrow 0$ 时的物理合理性，其形式为^[17]：

$$V_i(R) = -\frac{\alpha q^2}{2R^4} + A \exp(-BR), \quad (1)$$

其中 R 为核间距， q 为铀离子电荷数， $\alpha = 4.5$ a.u. 为氢原子静态极化率， $A = 25q$ 和 $B = -1.8$ a.u. 为调节短程排斥强度的半经验参数。

出射通道势能 $V_{f,j}(R)$ 描述产物离子对 $U^{(q-1)+}$ 与 H^+ 之间的库仑排斥，叠加与具体俘获态 j 相关的渐近能量偏移：

$$V_{f,j}(R) = \frac{q-1}{R} - \Delta E_j, \quad (2)$$

其中 j 表示具体出射通道， $\Delta E_j = I_H - E_U^{(q-1)+}(nl)$ 为第 j 个出射通道相对于入射通道的渐近能量差， $I_H = 0.5$ a.u. 为氢原子电离势， $E_U^{(q-1)+}(nl)$ 表示电子俘获至 $U^{(q-1)+}$ 离子 (nl) 态时相对于相应电离极限的结合能，其数值由 NIST 原子光谱数据整理获得^[27–33]。

第 j 个出射通道对应的避免交叉点 $R_{x,j}$ 由 $V_i(R_{x,j}) = V_{f,j}(R_{x,j})$ 确定；在不引起混淆时，下文也将交叉点位置简记为 R_x 。本文采用网格扫描结合二分法，在 1–20 a.u. 范围内对每个出射通道精确定位各交叉点位置。在交叉点处，单次穿越的非绝热跃迁概率由 Landau-Zener 公式描述^[34]：

$$p_j = \exp(-2\pi\delta_j), \quad \delta_j = \frac{|H_{12,j}|^2}{2v_r|\Delta F_j|}, \quad (3)$$

其中 $v_r = \sqrt{2[E - V_{\text{eff}}(R_{x,j})]/\mu}$ 为碰撞体在交叉点处的径向速度， E 为质心系碰撞能量， μ 为约化质量， $V_{\text{eff}}(R) = V_i(R) + \hbar^2 J(J+1)/(2\mu R^2)$ 为给定总角动量 J 下的入射通道有效势， $|\Delta F_j| = |d(V_i - V_{f,j})/dR|_{R_{x,j}}$ 为两条势能曲线在交叉点处的斜率差， $H_{12,j}$ 为非对角耦合矩阵元。无量纲 Landau-Zener 参数 δ_j 刻画非绝热耦合强度与碰撞速度的竞争关系，其大小决定跃迁概率在绝热与非绝热极限间的过渡行为。

非对角耦合矩阵元 $H_{12,j}$ 的估算视电荷态而异。对于低电荷态 ($q \leq 4$)，氢原子 $1s$ 轨道的指数衰减特性主导耦合行为，采用 Butler-Dalgarno 半经验模型^[17]：

$$H_{12,j} = R_{x,j} \exp\left(-R_{x,j} \sqrt{2I_H}\right); \quad (4)$$

对于高电荷态 ($q > 4$)，俘获电子进入铀离子特定 nl 亚壳层，需引入量子数依赖因子以反映亚壳层结构的影响，采用 Taulbjerg 模型^[35]：

$$H_{12,j} = (9.13 f_{nl}/\sqrt{q}) \exp\left(-1.324 R_{x,j} \sqrt{2I_H} \sqrt{q}\right), \quad (5)$$

其中

$$f_{nl} = (-1)^{n+l+1} (2l+1)^{1/2} \Gamma(n) [\Gamma(n+l+1) \Gamma(n-l)]^{-1/2} \quad (6)$$

为与俘获态 (n, l) 相关的归一化因子，反映不同亚壳层对电子俘获概率的差异性贡献。

当出射通道不止一个时，碰撞轨迹在入射和出射路径上将依次穿越多个避免交叉点，各交叉点间的量子干涉效应不可忽略。本文采用 Janev 等导出的多通道递归公式^[18] 确定电子俘获到第 n 通道的总概率 P_n ：

$$\begin{aligned} P_n = & p_1 p_2 \cdots p_{n-1} (1 - p_n)^2 q_n \\ & + p_1 p_2 \cdots p_{n-1} (1 - p_n) \left[1 + (p_{n+1} \cdots p_N)^2 \right. \\ & + (p_{n+1} \cdots p_{N-1})^2 (1 - p_N)^2 (1 - q_N) + \cdots \\ & \left. + p_{n+1}^2 (1 - p_{n+2})^2 (1 - q_{n+2}) + (1 - p_{n+1})^2 (1 - q_{n+1}) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $q_k = 1 - p_k^2$ 为在第 k 个交叉点发生反射的概率， N 为出射通道总数。该递归公式完整描述了碰撞过程中入射-出射双程穿越所有交叉点时的多次跃迁与反射干涉效应，确保了总概率的守恒性。

基于上述跃迁概率，通道 n 对应的分截面由半经典分波求和确定：

$$\sigma_n(E) = \frac{\pi \hbar^2 g_i}{2\mu E} \sum_{J=0}^{J_{\max}} P_n(J, E) (2J+1), \quad (8)$$

其中 E 为质心系碰撞能量， $P_n(J, E)$ 为给定总角动量 J 和能量 E 下俘获到第 n 个出射通道的 Landau-Zener 总跃迁概率， g_i 为初态分子对称性的统计权重， $J_{\max}$ 为参与分波求和的最大总角动量，由有效离心势垒条件确定。对于同一电子组态下的多个分子对称性（如 Σ 、 Π 、 Δ 等），各对称性通道的势能曲线形状相同，Landau-Zener 跃迁概率一致，截面之差仅体现在统计权重因子 g_i 上；因此，总截面通过对所有分

子对称性的统计权重求和获得,即以 $\sum g_i$ 替代式 (8) 中的 g_i 。各通道分截面之和即为该电荷态的总电荷转移截面 $\sigma(E) = \sum_n \sigma_n(E)$ 。

为便于在等离子体建模和天体物理辐射输运研究中直接应用,在 0.001–1000 eV/u 的对数能量网格上,通过 Maxwell-Boltzmann 分布积分获取各通道的速率系数:

$$K_n(T) = \sqrt{\frac{8}{\pi\mu(k_B T)^3}} \int_0^\infty E \sigma_n(E) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE, \quad (9)$$

其中 T 为等离子体温度, k_B 为 Boltzmann 常数, $K_n(T)$ 为第 n 个出射通道的温度相关速率系数。总速率系数 $K(T) = \sum_n K_n(T)$ 可直接用于等离子体粒子数布居方程的求解。

由于目前尚缺乏覆盖完整铀离子序列的系统实验与高精度全量子理论数据,本文无法给出严格意义上的逐点误差评估。因此,本文主要从模型适用性、输入数据一致性、交叉点数值求解稳定性以及截面和速率系数随能量、电荷态和温度变化的物理自洽性等方面对数据可靠性进行评估。本文结果的不确定性主要来源于半经验入射通道势能、非对角耦合矩阵元估算,以及短程非绝热耦合、转动耦合和非相邻通道耦合的忽略。已有类似低能离子/原子-氢碰撞体系的比较研究表明,对于由长程避免交叉主导的强电荷转移通道, Landau-Zener 类方法通常能够较好再现全量子结果的能量依赖趋势和数量级;对于总截面或主导通道,其偏差通常在一个数量级以内,而对于弱反应通道或短程耦合显著的过程,偏差可能扩大至数个数量级^[36]。因此,本文给出的总电荷转移截面和速率系数应理解为统一 MCLZ 框架下的模型预测结果,其能量依赖规律、电荷态演化趋势特征具有较好的参考价值;但对于弱反应通道以及高能区结果,仍需未来的全量子动力学计算或实验测量进一步验证。

3 结果与讨论

基于上述 MCLZ 模型,本工作系统研究了 U^{q+} ($q = 3-92$) 与氢原子碰撞单电子俘获过程的总电荷转移截面,碰撞能量范围为 0.001–1000 eV/u。需要指出的是,对于 $q = 3-89$ 的绝大多数电荷态, NIST 仅提供可靠的基态光谱项和能级信息^[27–33],因此对每个电荷态选取唯一的主导出射通道;对于 $q = 90$ (类氦体系)、 $q = 91$ (类氢体系) 和 $q = 92$ (裸核体系), NIST 提供了系统完整的多 nl 态能级,故显式包含所有主要出射通道,以充分描述密集避免交叉带来的多通道耦合效应。此外,少数电荷态 ($q = 1, 2$ 以及 $q = 34, 51, 59, 68, 69, 85$) 因在所考察的核间距范围内势能曲线不存在交叉点或 NIST 缺乏可靠的光谱项信息,未纳入本文研究。其余电荷态均基于 NIST 最可靠的光谱项信息构建反应通道。表 1 列出了正文讨论涉及的主要电荷态的通道参数,所有电荷态的完整通道参数及截面、速率

系数数值数据集均以 PDF 等格式在补充材料中给出, 详见国家科学数据库 (ScienceDB) 补充数据集 (<https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00235>)。

表 1: $U^{q+} + H(1s^2S) \rightarrow U^{(q-1)+} + H^+(^1S)$ 电荷转移反应的共同分子对称性、总统计权重、俘获态结合能与避免交叉点位置。

Table 1. Common molecular symmetry, total statistical weight, capture state binding energy, and avoided crossing point position for charge transfer reactions $U^{q+} + H(1s^2S) \rightarrow U^{(q-1)+} + H^+(^1S)$.

$U^{q+} + H(1s^2S) \rightarrow U^{(q-1)+} + H^+(^1S)$	共同分子对称性	$\sum g_i$	$E_U^{(q-1)+}(nl)$ (cm^{-1})	R_x (a.u.)
$U^{3+}(5f^3 6p^6 \ ^4I^o) \rightarrow U^{2+}(5f^4 \ ^5I)$	$^5\Pi, ^5\Delta, ^5\Phi, ^5\Gamma, ^5H, ^5I$	15/26	159700	8.9109
$U^{4+}(5f^2 6p^6 \ ^3H) \rightarrow U^{3+}(5f^3 6p^6 \ ^4I^o)$	$^4\Sigma^-, ^4\Pi, ^4\Delta, ^4\Phi, ^4\Gamma, ^4H$	2/3	296000	3.8327
$U^{7+}(6p^5 \ ^2P^o) \rightarrow U^{6+}(6p^6 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/12	718000	2.8253
$U^{10+}(6p^2 \ ^3P) \rightarrow U^{9+}(6p^3 \ ^4S^o)$	$^4\Sigma^-$	2/9	1040000	3.1687
$U^{15+}(5d^9 \ ^2D) \rightarrow U^{14+}(5d^{10} \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/20	2605000	2.7417
$U^{20+}(5d^4 \ ^5D) \rightarrow U^{19+}(5d^5 \ ^6S)$	$^6\Sigma^+$	3/25	3694000	2.9164
$U^{25+}(4f^{14} 5p^5 \ ^2P^o) \rightarrow U^{24+}(4f^{14} \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/12	5893000	2.8382
$U^{28+}(4f^{14} 5p^2 \ ^3P) \rightarrow U^{27+}(4f^{14} 5p^3 \ ^2P^o)$	$^2\Pi$	2/9	6740000	2.9084
$U^{31+}(4f^{14} 5s \ ^2S) \rightarrow U^{30+}(4f^{14} \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/4	8650000	2.8453
$U^{33+}(4f^{13} \ ^2F^o) \rightarrow U^{32+}(4f^{14} \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/28	9780000	2.8380
$U^{40+}(4f^6 \ ^7F) \rightarrow U^{39+}(4f^7 \ ^8S^o)$	$^8\Sigma^-$	4/49	14080000	2.8316
$U^{47+}(4d^9 \ ^2D) \rightarrow U^{46+}(4d^{10} \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/20	20793000	2.7592
$U^{57+}(4p^5 \ ^2P^o) \rightarrow U^{56+}(4p^6 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/12	29052000	2.7867
$U^{63+}(4s \ ^2S) \rightarrow U^{62+}(4s^2 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/4	36400000	2.7602
$U^{65+}(3d^9 \ ^2D) \rightarrow U^{64+}(3d^{10} \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/20	59629000	2.4476
$U^{75+}(3p^5 \ ^2P^o) \rightarrow U^{74+}(3p^6 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/12	78365000	2.4539
$U^{78+}(3p^2 \ ^3P) \rightarrow U^{77+}(3p^3 \ ^2P^o)$	$^2\Pi$	2/9	82301000	2.4728
$U^{81+}(3s \ ^2S) \rightarrow U^{80+}(3s^2 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/4	96674000	2.4164
$U^{82+}(2p^6 \ ^1S) \rightarrow U^{81+}(3s \ ^2S)$	$^2\Sigma^+$	1	98117000	2.4225
$U^{83+}(2p^5 \ ^2P^o) \rightarrow U^{82+}(2p^6 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/12	203720000	2.0139
$U^{89+}(2s \ ^2S) \rightarrow U^{88+}(2s^2 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/4	261114000	1.9591
$U^{90+}(1s^2 \ ^1S) \rightarrow U^{89+}(1s^2 2s \ ^2S)$	$^2\Sigma^+$	1	264844000	1.9677
$U^{90+}(1s^2 \ ^1S) \rightarrow U^{89+}(1s^2 2p \ ^2P^o)$	$^2\Sigma^+$	1	267107520	1.9633
$U^{91+}(1s \ ^2S) \rightarrow U^{90+}(1s^2 \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/4	1045051800	4.1046
$U^{91+}(1s \ ^2S) \rightarrow U^{90+}(1s 3s \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/4	1974821100	3.6754
$U^{91+}(1s \ ^2S) \rightarrow U^{90+}(1s 5s \ ^1S)$	$^1\Sigma^+$	1/4	2050382800	2.8852
$U^{91+}(1s \ ^2S) \rightarrow U^{90+}(1s 2s \ ^3S)$	$^3\Sigma^+$	3/4	1819561260	4.0513
$U^{91+}(1s \ ^2S) \rightarrow U^{90+}(1s 3p \ ^3P^o)$	$^3\Sigma^+$	3/4	1974572700	3.6729
$U^{91+}(1s \ ^2S) \rightarrow U^{90+}(1s 5p \ ^3P^o)$	$^3\Sigma^+$	3/4	2050332300	2.8825
$U^{92+}(^1S) \rightarrow U^{91+}(1s \ ^2S)$	$^2\Sigma^+$	1	1063169000	2.5133
$U^{92+}(^1S) \rightarrow U^{91+}(2p \ ^2P^o)$	$^2\Sigma^+$	1	1850462500	2.4502
$U^{92+}(^1S) \rightarrow U^{91+}(2s \ ^2S)$	$^2\Sigma^+$	1	1851075000	2.4490
$U^{92+}(^1S) \rightarrow U^{91+}(3p \ ^2P^o)$	$^2\Sigma^+$	1	2008027000	1.9662

表 1 中呈现出若干值得关注的规律性特征。就避免交叉点位置 R_x 而言, $q = 13-91$ 的绝大多数电荷态集中分布在 2.0–3.0 a.u. 这一相当窄的区间内, 而低电荷态因电离能较小、能级差 ΔE 偏低, R_x 显著偏大 (如 $q = 3$ 时 $R_x = 8.91$ a.u.)。各通道共同分子对称性的统计权重之和 $\sum g_i$ 差异显著 (从 1/28 到 1 不等), 电离能在壳层填满边界处 (如 $q = 83$ 的 $2p^5/2p^6$) 呈现明显的阶跃特征。

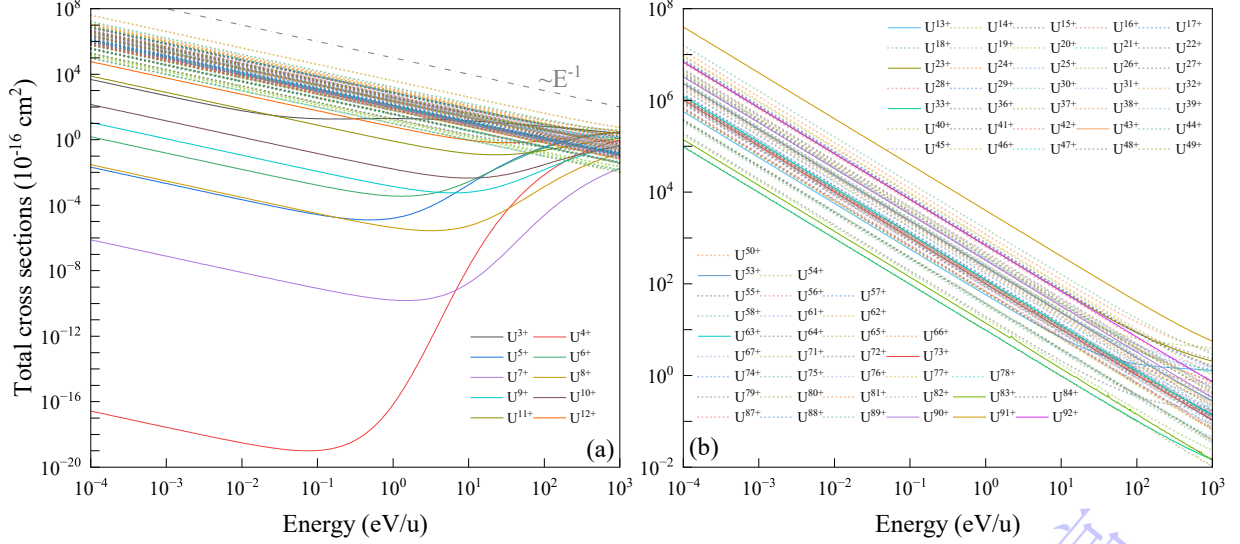


图 1 U^{q+} ($q = 3-92$) + H 碰撞体系总电荷转移截面随碰撞能量的变化。子图 (a) 为全部电荷态结果, 子图 (b) 为 $q = 13-92$ 的高电荷态结果, 其中 $q = 13, 23, 33, 43, 53, 63, 73, 83, 90, 91, 92$ 的曲线加粗标示。

Fig. 1. Total charge transfer cross sections for the U^{q+} ($q = 3-92$) + H collision system as a function of collision energy. Panel (a) shows all results and panel (b) for high charge states ($q = 13-92$). Curves for $q = 13, 23, 33, 43, 53, 63, 73, 83, 90, 91, 92$ are highlighted with bold lines.

图 1 展示了 U^{q+} ($q = 3-92$) + H 体系总电荷转移截面随碰撞能量的变化关系。为描述低电荷态截面的非单调能量依赖, 本文定义特征转折能量 E_t , 为总截面 $\sigma(E)$ 随碰撞能量升高由下降转为回升时对应的第一个局部极小点能量。在对数能量网格上获得 $\sigma(E)$ 后, 通过局部斜率 $d \ln \sigma / d \ln E$ 由负值转为正值的位置可以确定 E_t 。可以发现, 对于存在明显非单调行为的低电荷态 ($q = 3-12$), 截面在 $E \lesssim E_t$ 的低能区近似遵循 E^{-1} 标度律, 随碰撞能量升高表现出明显的非单调特征, 在特征转折能量 E_t 附近偏离 E^{-1} 行为并开始回升, 此后在更高能量处增长放缓并再度转为下降。以 $q = 3$ 为例, 截面在 $E \lesssim 0.04$ eV/u 时呈 E^{-1} 下降, 在约 0.04–2 eV/u 区间回升, 此后逐渐转为下降。这一行为可从入射通道有效势的角度予以理解。入射通道有效势可写为 $V_{\text{eff}}(R) = V_i(R) + \hbar^2 J(J+1)/(2\mu R^2)$ 。在低能长程区, 其主要由极化吸引项

$-\alpha q^2/(2R^4)$ 与离心排斥项 $\hbar^2 J(J+1)/(2\mu R^2)$ 的竞争决定。对于低电荷态，极化吸引较弱，离心势垒对低能分波到达避免交叉区具有明显限制。当 $E < E_t$ 时，有效参与俘获的分波数变化较小，截面主要受式 (8) 中前置因子 $1/E$ 控制，因而近似呈 E^{-1} 下降。当碰撞能量升高并超过相应势垒限制后，更多分波能够到达避免交叉区并参与电子俘获，使截面偏离 E^{-1} 行为并出现回升。在更高能量处，Landau-Zener 参数 $\delta_j \propto 1/v_r$ 随径向速度增大而减小，跃迁概率降低，截面又逐渐转为下降^[17-19]。特征转折能量 E_t 随 q 增大而整体升高，这反映出入射通道极化吸引增强后，低能分波到达避免交叉区的限制逐渐减弱。

当 $q \gtrsim 13$ 时，图 1(b) 所示截面曲线在本文考察的能区内未出现可分辨的局部极小点，非单调特征基本消失，截面在全能区近似遵循 E^{-1} 标度规律。需要说明的是，图 1(b) 中部分高电荷态曲线存在细小的局部锯齿或阶梯状变化，其中 U^{83+} 较为明显，其他由于曲线加粗而被覆盖。该现象主要来源于 MCLZ 分波求和中整数角动量 J 和最大分波 $J_{\max}$ 随能量变化的离散性。该数值特征对截面的整体数量级和能量依赖趋势影响可以忽略，不改变截面近似遵循 E^{-1} 的标度规律。

进一步地，截面大小并不只由电荷数 q 决定。由式 (8) 可知，总截面还取决于有效参与分波数、Landau-Zener 跃迁概率 $P_n(J, E)$ 和统计权重 g_i ；其中 $P_n(J, E)$ 又与避免交叉点位置、非绝热耦合强度及通道能量匹配密切相关。因此，相邻低电荷态即使 q 值接近，也可能因电子组态和通道能级差不同而表现出明显不同的俘获截面。比如，图 1(a) 中 $q = 4$ 在低能区截面最小，说明该电荷态的有效俘获条件相对不利，可理解为低能分波到达避免交叉区受限、非绝热耦合效率较低以及统计权重共同作用的结果^[17,18,35]。

图 2 展示了七个典型碰撞能量 (5×10^{-4} –500 eV/u) 下总电荷转移截面随电荷态 q 的变化关系。在低电荷态区间 ($q = 3$ –12)，截面随 q 的变化极不规则， $q = 4$ 和 $q = 7$ 附近出现深度极小值，与图 1(a) 中相应电荷态截面的能量依赖行为相互印证。自 $q \approx 13$ 起，截面在所有能量下整体跃升至 10^1 – $10^5 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ 量级，低能曲线位于上方、高能曲线位于下方，符合 E^{-1} 普适标度。值得注意的是在 $q \geq 13$ 的高电荷态区间，截面随 q 总体趋于平缓，但叠加了显著的阶梯状起伏。这些起伏在全部七条能量曲线上同步出现于相同的 q 值，表明其根源在于铀离子的电子结构而非碰撞动力学本身。对照表 1 中的电子组态与电离能信息，截面极小值的出现与铀离子电子组态从未满壳层向满壳层（或满半壳层）的过渡严格对应。满壳层 (d^{10} 、 f^{14}) 和满半壳层 (f^7) 因交换能稳定化而具有额外的电子结合能，使电离能异常偏高^[27,28,37]，进而导致入射与出射通道间的能量差 $|\Delta E|$ 增大、避免交叉点 R_x 向内收缩、耦合强度降低，俘获截面因此被系统性压低。这一规律在 $q = 15$ ($5d^{10}$ 满壳层)、 $q = 33$ ($4f^{14}$ 满壳层)、 $q = 40$ ($4f^7$ 满半壳层) 及 $q = 65$ ($3d^{10}$ 满壳层) 处均有清晰体现。上述发现表明，截面随 q 的变化曲线可作为探测铀离子逐级电子

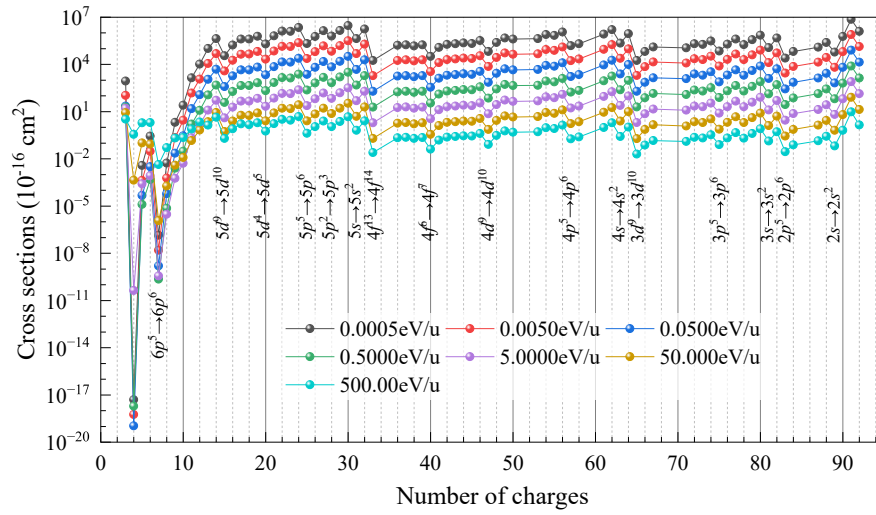


图 2 $U^{q+} + H$ 碰撞体系总电荷转移截面随电荷态 q 的变化。各曲线对应碰撞能量分别为 0.0005、0.005、0.05、0.5、5、50 和 500 eV/u。

Fig. 2. Total charge transfer cross sections for the $U^{q+} + H$ collision system as a function of charge state q at selected collision energies of 0.0005, 0.005, 0.05, 0.5, 5, 50, and 500 eV/u.

组态演化的灵敏探针。

此外，截面的绝对大小与出射通道的数目及通道间能量差 ΔE 密切相关。 U^{91+} 包含 $^1\Sigma^+$ 和 $^3\Sigma^+$ 两组共计 25 个出射通道（对应 U^{90+} 的 $1snl$ 激发态系列），多通道贡献的叠加使其总截面在七条曲线上均呈现为最突出的峰值。

图 3 展示了 U^{q+} ($q = 3-92$) + H 体系总电荷转移速率系数随温度 ($1-10^5$ K) 的变化关系。速率系数由截面对 Maxwell-Boltzmann 分布积分获得，其温度依赖行为与截面的能量依赖规律形成直接映射^[38,39]。对于高电荷态 ($q \geq 13$)，截面的 E^{-1} 标度律经热平均后转化为速率系数在全温区近似遵循 $T^{-1/2}$ 单调下降，各曲线近似平行，绝对值处于 $10^{-9}-10^{-4}$ cm³/s 区间，截面中的壳层起伏特征在速率系数中亦得以忠实保留。对于低电荷态 ($q = 3-12$)，截面的非单调能量依赖经热平均后同样反映在速率系数的温度行为中：速率系数在低温端随温度升高而下降，在某一特征温度附近伴随截面回升而发生急剧跃升。以 U^{4+} 为例，其截面在低能区被压低至极小，对应速率系数在 $T \lesssim 10^3$ K 时维持在极低水平，随后伴随截面的急剧增大而跃升数十个量级。上述结果覆盖了千新星抛出物 ($T \sim 10^3-10^4$ K)、聚变装置边界等离子体 ($T \sim 10^4-10^5$ K) 以及重离子加速器束流管道（室温至 10^3 K）等典型应用场景的参数范围，可直接服务于相关等离子体建模与束流设计。

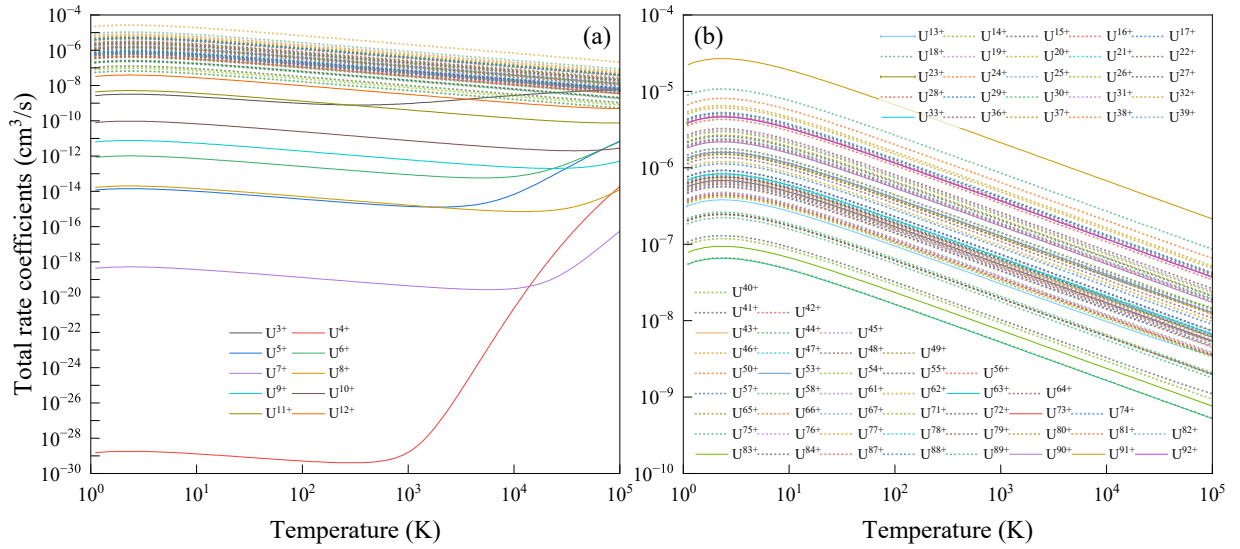


图 3 $U^{q+} + H$ 碰撞体系总电荷转移速率系数随温度的变化。子图 (a) 为全部电荷态结果，子图 (b) 为 $q = 13-92$ 的高电荷态结果，加粗曲线与图 1 中标示的电荷态一一对应。

Fig. 3. Total charge transfer rate coefficients for the $U^{q+} + H$ collision system as a function of temperature. Panel (a) shows all results and panel (b) for high charge states ($q = 13-92$). Bold curves correspond to the same charge states highlighted in Figs.1.

4 结论

本文在统一的 MCLZ 理论框架下，对 U^{q+} ($q = 3-92$) 与氢原子低能碰撞 (0.001–1000 eV/u) 的单电子俘获过程开展了系统研究，首次将铀的几乎完整电离序列纳入统一的理论框架，并获取了各电荷态的总电荷转移截面及速率系数。研究揭示了以下核心物理规律：低电荷态 ($q \leq 12$) 截面在各自特征转折能量 E_t 以下的低能段近似遵循 E^{-1} 标度律，并因入射通道有效势垒限制而呈现非单调能量依赖；对于 $q \gtrsim 13$ 的高电荷态，本文计算能区内未出现可分辨的非单调转折，截面在全能区近似保持 E^{-1} 标度行为。截面随电荷态的演化受铀离子壳层结构的深层调制，满壳层与满半壳层构型处截面出现系统性极小值，这一对应关系贯穿 $5d$ 、 $4f$ 、 $4d$ 、 $3d$ 等多个亚壳层的逐级剥离过程，表明截面随 q 变化可作为探测铀离子电子组态演化的灵敏探针；速率系数保留了与截面一致的趋势特征，高电荷态在全温区呈 $T^{-1/2}$ 单调下降。本文结果覆盖千新星抛出物、聚变边界等离子体及重离子加速器束流管道的典型参数范围，可直接服务于相关等离子体建模与束流设计。后续工作可针对加速器重点电荷态结合从头算方法开展基准校验，并将所得截面与速率系数纳入千新星非平衡电离模型，推动铜系元素在千新星光谱诊断中的定量应用。建议相关研究在本文给出的能量、温度及电荷态范围内直接调用或插值使用本数据集；对于超出适用范围的外推，或对

个别关键电荷态有更高精度要求的应用，应结合更高层次理论进一步校验。

数据可用性声明

支撑本研究数据的数据集可在科学数据银行 (<https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00235>) 中访问获取。

参考文献

- [1] Tolstikhina I Y, Shevelko V P 2018 *Phys. Usp* **61** 247
- [2] Deco G R, Rivarola R D 1988 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21** 1229
- [3] Ma X W, Zhang S F, Wen W Q, Huang Z K, Hu Z M, Guo D L, Gao J W, Najjari B, Xu S Y, Yan S C, Yao K, Zhang R T, Gao Y, Zhu X L 2022 *Chin. Phys. B* **31** 093401. (in Chinese) [马新文, 张少锋, 汶伟强, 黄忠魁, 胡智民, 郭大龙, 高俊文, Bennaceur Najjari, 许慎跃, 闫顺成, 姚科, 张瑞田, 高永, 朱小龙 2022 中国物理 B **31** 093401]
- [4] Tolstikhina I Y, Shevelko V P 2013 *Phys. Usp* **56** 213
- [5] Yin X H, Li Y Y, Fu J, Jiang D, Feng S Y, Zhong L J, Lu B, Ye M Y, Wan B N 2016 *Acta Opt. Sin.* **36** 310. (in Chinese) [尹相辉, 李颖颖, 符佳, 江堤, 冯双园, 钟刘军, 吕波, 叶民友, 万宝年 2016 光学学报 **36** 310]
- [6] Zhao Y Q, Liu L, Liu C L, Xue P, Wang J G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3248
- [7] Weber G, Omet C, Dubois R D, Lucio Ó G d, Stoehlker T, Brandau C, Gumberidze A, Hagmann S, Hess S A, Kozhuharov C, Reuschl R, Spiller P, Spillmann U, Steck M, Thomason M, Trotsenko S 2009 *Phys. Rev. ST Accel. Beams* **12** 084201
- [8] Abbott B P, Abbott R, Abbott T D, Acernese F, Ackley K, Adams C, Adams T, Addesso P, Adhikari R X, Adya V B, Affeldt C, Afrough M, Agarwal B, Agathos M, Agatsuma K, Aggarwal N, Aguiar O D, Aiello L, Ain A, Ajith P, Allen B, Allen G, Allocca A, Altin P A, Amato A, Ananyeva A, Anderson S B, Anderson W G, Angelova S V, Antier S, Appert S, Arai K, Araya M C, Areeda J S,

Arnaud N, Arun K G, Ascenzi S, Ashton G, Ast M, Aston S M, Astone P, Atallah D V, Aufmuth P, Aulbert C, Austin C, Avila-Alvarez A, Babak S, Bacon P, Bader M K M, Bae S, Bailes M, Baker P T, Baldaccini F, Ballardini G, Ballmer S W, Banagiri S, Barayoga J C, Barclay S E, Barish B C, Barker D, Barkett K, Barone F, Barr B, Barsotti L, Barsuglia M, Barta D, Barthelmy S D, Bartlett J, Bartos I, Bassiri R, Basti A, Batch J C, Bawaj M, Bayley J C, Bazzan M, Bécsy B, Beer C, Beijger M, Belahcene I, Bell A S, Berger B K, Bergmann G, Bernuzzi S, Bero J J, Berry C P L, Bersanetti D, Bertolini A, Betzwieser J, Bhagwat S, Bhandare R, Bilenko I A, Billingsley G, Billman C R, Birch J, Birney I A, Birnholtz O, Biscans S, Biscoveanu S, Bisht A, Bitossi M, Biwer C, Bizouard M A, Blackburn J K, Blackman J, Blair C D, Blair D G, Blair R M, Bloemen S, Bock O, Bode N, Boer M, Bogaert G, Bohe A, Bondu F, Bonilla E, Bonnand R, Boom B A, Bork R, Boschi V, Bose S, Bossie K, Bouffanais Y, Bozzi A, Bradaschia C, Brady P R, Branchesi M, Brau J E, Briant T, Brillet A, Brinkmann M, Brisson V, Brockill P, Broida J E, Brooks A F, Brown D A, Brown D D, Brunett S, Buchanan C C, Buikema A, Bulik T, Bulten H J, Buonanno A, Buskulic D, Buy C, Byer R L, Cabero M, Cadonati L, Cagnoli G, Cahillane C, Calderón Bustillo J, Callister T A, Calloni E, Camp J B, Canepa M, Canizares P, Cannon K C, Cao H, Cao J, Capano C D, Capocasa E, Carbognani F, Caride S, Carney M F, Carullo G, Casanueva Diaz J, Casentini C, Caudill S, Cavaglià M, Cavalier F, Cavalieri R, Cella G, Cepeda C B, Cerdá-Durán P, Cerretani G, Cesarini E, Chamberlin S J, Chan M, Chao S, Charlton P, Chase E, Chassande-Mottin E, Chatterjee D, Chatziioannou K, Cheeseboro B D, Chen H Y, Chen X, Chen Y, Cheng H P, Chia H, Chincarini A, Chiummo A, Chmiel T, Cho H S, Cho M, Chow J H, Christensen N, Chu Q, Chua A J K, Chua S, Chung A K W, Chung S, Ciani G, Ciolfi R, Cirelli C E, Cirone A, Clara F, Clark J A, Clearwater P, Clea F, Cocchieri C, Coccia E, Cohadon P F, Cohen D, Colla A, Collette C G, Cominsky L R, Constancio M, Conti L, Cooper S J, Corban P, Corbitt T R, Cordero-Carrión I, Corley K R, Cornish N, Corsi A, Cortese S, Costa C A, Coughlin M W, Coughlin S B, Coulon J P, Countryman S T, Couvares P, Covas P B, Cowan E E, Coward D M, Cowart M J, Coyne D C, Coyne R, Creighton J D E, Creighton T D, Cripe J, Crowder S G, Cullen T J, Cumming A, Cunningham L, Cuoco E, Dal Canton T, D'alya G, Danilishin S L, D'Antonio S, Danzmann K, Dasgupta A, Da Silva Costa C F, Dattilo V, Dave

I, Davier M, Davis D, Daw E J, Day B, De S, DeBra D, Degallaix J, De Laurentis M, Deléglise S, Del Pozzo W, Demos N, Denker T, Dent T, De Pietri R, Dergachev V, De Rosa R, DeRosa R T, De Rossi C, DeSalvo R, de Varona O, Devenson J, Dhurandhar S, Díaz M C, Dietrich T, Di Fiore L, Di Giovanni M, Di Girolamo T, Di Lieto A, Di Pace S, Di Palma I, Di Renzo F, Doctor Z, Dolique V, Donovan F, Dooley K L, Doravari S, Dorrington I, Douglas R, Dovale Álvarez M, Downes T P, Drago M, Dreissigacker C, Driggers J C, Du Z, Ducrot M, Dudi R, Dupej P, Dwyer S E, Edo T B, Edwards M C, Effler A, Eggenstein H B, Ehrens P, Eichholz J, Eikenberry S S, Eisenstein R A, Essick R C, Estevez D, Etienne Z B, Etzel T, Evans M, Evans T M, Factourovich M, Fafone V, Fair H, Fairhurst S, Fan X, Farinon S, Farr B, Farr W M, Fauchon-Jones E J, Favata M, Fays M, Fee C, Fehrmann H, Feicht J, Fejer M M, Fernandez-Galiana A, Ferrante I, Ferreira E C, Ferrini F, Fidecaro F, Finstad D, Fiori I, Fiorucci D, Fishbach M, Fisher R P, Fitz-Axen M, Flaminio R, Fletcher M, Fong H, Font J A, Forsyth P W F, Forsyth S S, Fournier J D, Frasca S, Frasconi F, Frei Z, Freise A, Frey R, Frey V, Fries E M, Fritschel P, Frolov V V, Fulda P, Fyffe M, Gabbard H, Gadre B U, Gaebel S M, Gair J R, Gammaitoni L, Ganija M R, Gaonkar S G, Garcia-Quiros C, Garufi F, Gateley B, Gaudio S, Gaur G, Gayathri V, Gehrels N, Gemme G, Genin E, Gennai A, George D, George J, Gergely L, Germain V, Ghonge S, Ghosh A, Ghosh A, Ghosh S, Giaime J A, Giardina K D, Giazotto A, Gill K, Glover L, Goetz E, Goetz R, Gomes S, Goncharov B, González G, Gonzalez Castro J M, Gopakumar A, Gorodetsky M L, Gossan S E, Gosselin M, Gouaty R, Grado A, Graef C, Granata M, Grant A, Gras S, Gray C, Greco G, Green A C, Gretarsson E M, Groot P, Grote H, Grunewald S, Gruning P, Guidi G M, Guo X, Gupta A, Gupta M K, Gushwa K E, Gustafson E K, Gustafson R, Halim O, Hall B R, Hall E D, Hamilton E Z, Hammond G, Haney M, Hanke M M, Hanks J, Hanna C, Hannam M D, Hannuksela O A, Hanson J, Hardwick T, Harms J, Harry G M, Harry I W, Hart M J, Haster C J, Haughian K, Healy J, Heidmann A, Heintze M C, Heitmann H, Hello P, Hemming G, Hendry M, Heng I S, Hennig J, Heptonstall A W, Heurs M, Hild S, Hinderer T, Ho W C G, Hoak D, Hofman D, Holt K, Holz D E, Hopkins P, Horst C, Hough J, Houston E A, Howell E J, Hreibi A, Hu Y M, Huerta E A, Huet D, Hughey B, Husa S, Huttner S H, Huynh-Dinh T, Indik N, Inta R, Intini G, Isa H N, Isac J M, Isi M, Iyer B R, Izumi K, Jacqmin T, Jani K, Jaranowski P, Jawahar S,

Jiménez-Forteza F, Johnson W W, Johnson-McDaniel N K, Jones D I, Jones R, Jonker R J G, Ju L, Junker J, Kalaghatgi C V, Kalogera V, Kamai B, Kandhasamy S, Kang G, Kanner J B, Kapadia S J, Karki S, Karvinen K S, Kasprzack M, Kastaun W, Katolik M, Katsavounidis E, Katzman W, Kaufer S, Kawabe K, Kéfélian F, Keitel D, Kemball A J, Kennedy R, Kent C, Key J S, Khalili F Y, Khan I, Khan S, Khan Z, Khazanov E A, Kijbunchoo N, Kim C, Kim J C, Kim K, Kim W, Kim W S, Kim Y M, Kimbrell S J, King E J, King P J, Kinley-Hanlon M, Kirchhoff R, Kissel J S, Kleybolte L, Klimenko S, Knowles T D, Koch P, Koehlenbeck S M, Koley S, Kondrashov V, Kontos A, Korobko M, Korth W Z, Kowalska I, Kozak D B, Krämer C, Kringel V, Krishnan B, Królak A, Kuehn G, Kumar P, Kumar R, Kumar S, Kuo L, Kutynia A, Kwang S, Lackey B D, Lai K H, Landry M, Lang R N, Lange J, Lantz B, Lanza R K, Larson S L, Lartaux-Vollard A, Lasky P D, Laxen M, Lazzarini A, Lazzaro C, Leaci P, Leavey S, Lee C H, Lee H K, Lee H M, Lee H W, Lee K, Lehmann J, Lenon A, Leon E, Leonardi M, Leroy N, Letendre N, Levin Y, Li T G F, Linker S D, Littenberg T B, Liu J, Liu X, Lo R K L, Lockerbie N A, London L T, Lord J E, Lorenzini M, Loriette V, Lormand M, Losurdo G, Lough J D, Lousto C O, Lovelace G, Lück H, Lumaca D, Lundgren A P, Lynch R, Ma Y, Macas R, Macfoy S, Machenschalk B, MacInnis M, Macleod D M, Magaña Hernandez I, Magaña Sandoval F, Magaña Zertuche L, Magee R M, Majorana E, Maksimovic I, Man N, Mandic V, Mangano V, Mansell G L, Manske M, Mantovani M, Marchesoni F, Marion F, Márka S, Márka Z, Markakis C, Markosyan A S, Markowitz A, Maros E, Marquina A, Marsh P, Martelli F, Martellini L, Martin I W, Martin R M, Martynov D V, Marx J N, Mason K, Massera E, Masserot A, Massinger T J, Masso-Reid M, Mastrogiovanni S, Matas A, Matichard F, Matone L, Mavalvala N, Mazumder N, McCarthy R, McClelland D E, McCormick S, McCuller L, McGuire S C, McIntyre G, McIver J, McManus D J, McNeill L, McRae T, McWilliams S T, Meacher D, Meadors G D, Mehmet M, Meidam J, Mejuto-Villa E, Melatos A, Mendell G, Mercer R A, Merilh E L, Merzougui M, Meshkov S, Messenger C, Messick C, Metzдорff R, Meyers P M, Miao H, Michel C, Middleton H, Mikhailov E E, Milano L, Miller A L, Miller B B, Miller J, Millhouse M, Milovich-Goff M C, Minazzoli O, Minenkov Y, Ming J, Mishra C, Mitra S, Mitrofanov V P, Mitselmakher G, Mittleman R, Moffa D, Moggi A, Mogushi K, Mohan M, Mohapatra S R P, Molina I, Montani M, Moore C J, Moraru D,

Moreno G, Morisaki S, Morriss S R, Mours B, Mow-Lowry C M, Mueller G, Muir A W, Mukherjee A, Mukherjee D, Mukherjee S, Mukund N, Mullavey A, Munch J, Muñiz E A, Muratore M, Murray P G, Nagar A, Napier K, Nardecchia I, Naticchioni L, Nayak R K, Neilson J, Nelemans G, Nelson T J N, Nery M, Neunzert A, Nevin L, Newport J M, Newton G, Ng K K Y, Nguyen P, Nguyen T T, Nichols D, Nielsen A B, Nissanke S, Nitz A, Noack A, Nocera F, Nolting D, North C, Nuttall L K, Oberling J, O'Dea G D, Ogin G H, Oh J J, Oh S H, Ohme F, Okada M A, Oliver M, Oppermann P, Oram R J, O'Reilly B, Ormiston R, Ortega L F, O'Shaughnessy R, Ossokine S, Ottaway D J, Overmier H, Owen B J, Pace A E, Page J, Page M A, Pai A, Pai S A, Palamos J R, Palashov O, Palomba C, Pal-Singh A, Pan H, Pan H W, Pang B, Pang P T H, Pankow C, Pannarale F, Pant B C, Paoletti F, Paoli A, Papa M A, Parida A, Parker W, Pascucci D, Pasqualetti A, Passaquieti R, Passuello D, Patil M, Patricelli B, Pearlstone B L, Pedraza M, Pedurand R, Pekowsky L, Pele A, Penn S, Perez C J, Perreca A, Perri L M, Pfeiffer H P, Phelps M, Piccinni O J, Pichot M, Piergiovanni F, Pierro V, Pillant G, Pinard L, Pinto I M, Pirello M, Pitkin M, Poe M, Poggiani R, Popolizio P, Porter E K, Post A, Powell J, Prasad J, Pratt J W W, Pratten G, Predoi V, Prestegard T, Prijatelj M, Principe M, Privitera S, Prix R, Prodi G A, Prokhorov L G, Puncken O, Punturo M, Puppo P, Pürrier M, Qi H, Quetschke V, Quintero E A, Quitzow-James R, Raab F J, Rabeling D S, Radkins H, Raffai P, Raja S, Rajan C, Rajbhandari B, Rakhmanov M, Ramirez K E, Ramos-Buades A, Rapagnani P, Raymond V, Razzano M, Read J, Regimbau T, Rei L, Reid S, Reitze D H, Ren W, Reyes S D, Ricci F, Ricker P M, Rieger S, Riles K, Rizzo M, Robertson N A, Robie R, Robinet F, Rocchi A, Rolland L, Rollins J G, Roma V J, Romano J D, Romano R, Romel C L, Romie J H, Rosińska D, Ross M P, Rowan S, Rüdiger A, Ruggi P, Rutins G, Ryan K, Sachdev S, Sadecki T, Sadeghian L, Sakellariadou M, Salconi L, Saleem M, Salemi F, Samajdar A, Sammut L, Sampson L M, Sanchez E J, Sanchez L E, Sanchis-Gual N, Sandberg V, Sanders J R, Sassolas B, Sathyaprakash B S, Saulson P R, Sauter O, Savage R L, Sawadsky A, Schale P, Scheel M, Scheuer J, Schmidt J, Schmidt P, Schnabel R, Schofield R M S, Schönbeck A, Schreiber E, Schuette D, Schulte B W, Schutz B F, Schwalbe S G, Scott J, Scott S M, Seidel E, Sellers D, Sengupta A S, Sentenac D, Sequino V, Sergeev A, Shaddock D A, Shaffer T J, Shah A A, Shahriar M S, Shaner M B, Shao L, Shapiro B, Shawhan P, Sheperd A,

Shoemaker D H, Shoemaker D M, Siellez K, Siemens X, Sieniawska M, Sigg D, Silva A D, Singer L P, Singh A, Singhal A, Sintès A M, Slagmolen B J J, Smith B, Smith J R, Smith R J E, Somala S, Son E J, Sonnenberg J A, Sorazu B, Sorrentino F, Souradeep T, Spencer A P, Srivastava A K, Staats K, Staley A, Steinke M, Steinlechner J, Steinlechner S, Steinmeyer D, Stevenson S P, Stone R, Stops D J, Strain K A, Stratta G, Strigin S E, Strunk A, Sturani R, Stuver A L, Summerscales T Z, Sun L, Sunil S, Suresh J, Sutton P J, Swinkels B L, Szczepańczyk M J, Tacca M, Tait S C, Talbot C, Talukder D, Tanner D B, Tápai M, Taracchini A, Tasson J D, Taylor J A, Taylor R, Tewari S V, Theeg T, Thies F, Thomas E G, Thomas M, Thomas P, Thorne K A, Thorne K S, Thrane E, Tiwari S, Tiwari V, Tokmakov K V, Toland K, Tonelli M, Tornasi Z, Torres-Forné A, Torrie C I, Töyrä D, Travasso F, Traylor G, Trinastic J, Tringali M C, Trozzo L, Tsang K W, Tse M, Tso R, Tsukada L, Tsuna D, Tuyenbayev D, Ueno K, Ugolini D, Unnikrishnan C S, Urban A L, Usman S A, Vahlbruch H, Vajente G, Valdes G, Vallisneri M, van Bakel N, van Beuzekom M, van den Brand J F J, Van Den Broeck C, Vander-Hyde D C, van der Schaaf L, van Heijningen J V, van Veggel A A, Vardaro M, Varma V, Vass S, Vasúth M, Vecchio A, Vedovato G, Veitch J, Veitch P J, Venkateswara K, Venugopalan G, Verkindt D, Vetrano F, Viceré A, Viets A D, Vinciguerra S, Vine D J, Vinet J Y, Vitale S, Vo T, Vocca H, Vorvick C, Vyatchanin S P, Wade A R, Wade L E, Wade M, Walet R, Walker M, Wallace L, Walsh S, Wang G, Wang H, Wang J Z, Wang W H, Wang Y F, Ward R L, Warner J, Was M, Watchi J, Weaver B, Wei L W, Weinert M, Weinstein A J, Weiss R, Wen L, Wessel E K, Wessels P, Westerweck J, Westphal T, Wette K, Whelan J T, Whitcomb S E, Whiting B F, Whittle C, Wilken D, Williams D, Williams R D, Williamson A R, Willis J L, Willke B, Wimmer M H, Winkler W, Wipf C C, Wittel H, Woan G, Woehler J, Wofford J, Wong K W K, Worden J, Wright J L, Wu D S, Wysocki D M, Xiao S, Yamamoto H, Yancey C C, Yang L, Yap M J, Yazback M, Yu H, Yu H, Yvert M, Zadrożny A, Zanolin M, Zelenova T, Zendri J P, Zevin M, Zhang L, Zhang M, Zhang T, Zhang Y H, Zhao C, Zhou M, Zhou Z, Zhu S J, Zhu X J, Zimmerman A B, Zucker M E, Zweizig J 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 161101

- [9] Tanvir N R, Levan A J, González-Fernández C, Korobkin O, Mandel I, Rosswog S, Hjorth J, D’Avanzo P, Fruchter A S, Fryer C L, Kangas T, Milvang-Jensen B, Rosetti S, Steeghs D, Wollaeger R T, Cano

- Z, Copperwheat C M, Covino S, D’Elia V, de Ugarte Postigo A, Evans P A, Even W P, Fairhurst S, Jaimes R F, Fontes C J, Fujii Y I, Fynbo J P U, Gompertz B P, Greiner J, Hodosan G, Irwin M J, Jakobsson P, Jørgensen U G, Kann D A, Lyman J D, Malesani D, McMahon R G, Melandri A, O’Brien P T, Osborne J P, Palazzi E, Perley D A, Pian E, Piranomonte S, Rabus M, Rol E, Rowlinson A, Schulze S, Sutton P, Thöne C C, Ulaczyk K, Watson D, Wiersema K, Wijers R A M J 2017 *Astrophys. J. Lett.* **848** L27
- [10] Fontes C J, Fryer C L, Wollaeger R T, Mumpower M R, Sprouse T M 2022 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **519** 2862
- [11] Flörs A, Silva R F, Deprince J, Carvajal Gallego H, Leck G, Shingles L J, Martínez-Pinedo G, Sampaio J M, Amaro P, Marques J P, Goriely S, Quinet P, Palmeri P, Godefroid M 2023 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **524** 3083
- [12] Fontes C J, Fryer C L, Hungerford A L, Wollaeger R T, Korobkin O 2020 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **493** 4143
- [13] Spiller P, Franchetti G 2006 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **561** 305
- [14] Fritsch W, Lin C D 1991 *Phys. Rep.* **202** 1
- [15] Olson R E, Salop A 1977 *Phys. Rev. A* **16** 531
- [16] Kaganovich I D, Shnidman A, Mebane H, Davidson R C 2009 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* **606** 196
- [17] Butler S E, Dalgarno A 1980 *Astrophys. J.* **241** 838
- [18] Janev R K, Belić D S, Bransden B H 1983 *Phys. Rev. A* **28** 1293
- [19] Belyaev A K 1993 *Phys. Rev. A* **48** 4299
- [20] Cumbee R S, Mullen P D, Lyons D, Shelton R L, Fogle M, Schultz D R, Stancil P C 2018 *Astrophys. J.* **852** 7
- [21] Mullen P D, Cumbee R S, Lyons D, Stancil P C 2016 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **224** 31

- [22] Lyons D, Cumbee R S, Stancil P C 2017 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **232** 27
- [23] Wang Y, Alexeeva S, Wang F, Liu L, Wu Y, Wang J G, Zhao G, Yakovleva S A, Belyaev A K 2023 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **527** 2083
- [24] Yakovleva S A, Voronov Y V, Belyaev A K 2016 *Astron. Astrophys.* **593** A27
- [25] Tamura K, Adachi H, Ogura K, Ohba H, Shibata T 1999 *Jpn. J. Appl. Phys* **38** 6512
- [26] Tooma M, Ueno M, Tsuchida K, Kobayashi K, Suzuki K, Naitoh Y, Takizawa Y, Katou T 2000 *J. Nucl. Sci. Technol.* **37** 559
- [27] Carlson T A, Nestor C, Wasserman N, McDowell J 1970 *At. Data Nucl. Data Tables* **2** 63
- [28] Rodrigues G, Indelicato P, Santos J, Patté P, Parente F 2004 *At. Data Nucl. Data Tables* **86** 117
- [29] Sapirstein J, Cheng K T 2011 *Phys. Rev. A* **83** 012504
- [30] Beiersdorfer P, Chen H, Thorn D B, Träbert E 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 233003
- [31] Yerokhin V A, Surzhykov A 2019 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **48** 033104
- [32] Yerokhin V A, Shabaev V M 2015 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **44** 033103
- [33] Erickson G W 1977 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **6** 831
- [34] Zener C 1932 *Proc. R. Soc. Lond., Ser. A* **137** 696
- [35] Taulbjerg K 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** L367
- [36] Wang Y, Gong T, Li C L, Wang K, Yang Y K, Liu L, Liu J J, Fiser B, Yakovleva S A, Wu Y, Wang J G, Belyaev A K 2026 *Chin. Phys. Lett.* **43** 020303
- [37] Slater J C 1930 *Phys. Rev.* **36** 57
- [38] Schlier C G 1988 *Chem. Phys.* **126** 73
- [39] Fritzsche S, Maiorova A V, Wu Z W 2023 *Atoms* **11** 50

Charge transfer in low-energy U^{q+} ($q = 3-92$) + H collisions*

LI Xiaoxiao¹⁾ WANG Yu^{1)†} WANG Kun²⁾ YANG Yukun³⁾ TIAN Yali¹⁾
GONG Ting¹⁾ GUO Guqing¹⁾ HE Xiaohu¹⁾ LIU Ling⁴⁾ LI Chuanliang¹⁾
WU Yong⁴⁾ Svetlana A. Yakovleva⁵⁾ Andrey K. Belyaev⁵⁾

1) (*School of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China*)

2) (*School of Environmental Science, Shanxi University, Taiyuan 030006, China*)

3) (*School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453000, China*)

4) (*National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

5) (*Department of Theoretical Physics and Astronomy, Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg 191186, Russia*)

* Project supported by the National Key Laboratory of Computational Physics (Grant No. 6142A05QN250106), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12504297, 12204288, 12304279, and 12274040), the National Key R&D Program of China (Grant No. 2022YFA1602504), the Shanxi Province Foreign Experts Project (Grant No. 202504051012023), the Science and Technology Innovation Talent Team Project of Shanxi Province (Grant No. 202304051001034), the Shanxi Province Scientific Research Initial Funding (Grant No. 20252011), and the Taiyuan University of Science and Technology Scientific Research Initial Funding (Grant No. 20242149).

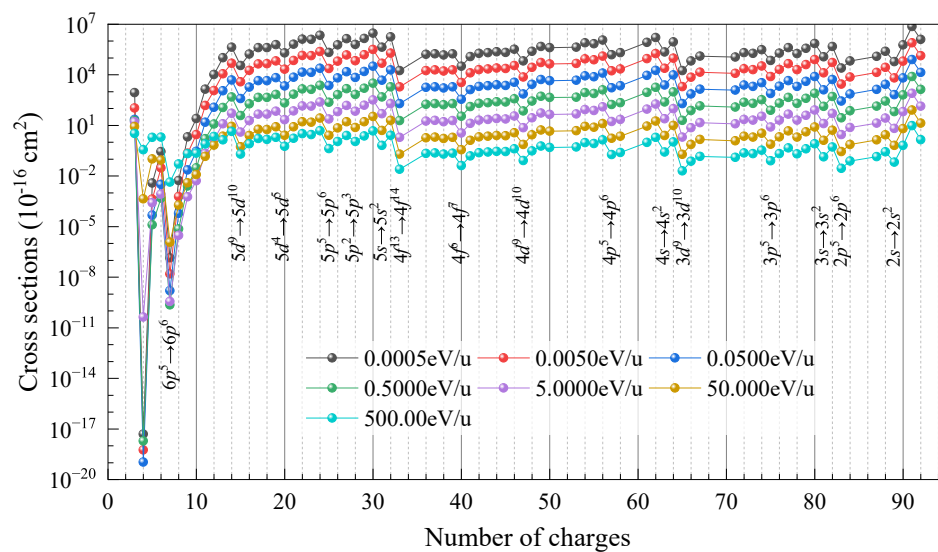
† Corresponding author. E-mail: wangy@tyust.edu.cn

The First Author. E-mail: lxx@tyust.edu.cn

Abstract

Charge transfer cross sections and rate coefficients for ion–hydrogen collisions are fundamental input data for kilonova radiative transfer modeling, fusion edge plasma diagnostics, and heavy-ion accelerator beam lifetime evaluation. Despite this broad demand, systematic theoretical data for the $U^{q+} + H$ system at low energies have been almost entirely absent prior to this work. In this study, total charge transfer cross sections and rate coefficients for single-electron capture in U^{q+} ($q = 3\text{--}92$) + $H(1s)$ collisions are investigated within the multichannel Landau-Zener (MCLZ) framework over collision energies from 0.001 to 1000 eV/u, representing the first unified treatment of nearly the complete uranium ionization sequence. The entrance-channel potential incorporates polarization attraction and short-range repulsion, while exit-channel potentials are constructed from Coulomb repulsion with asymptotic energy shifts derived from NIST spectroscopic data. Nonadiabatic coupling matrix elements are evaluated using the Butler-Dalgarno model for $q \leq 4$ and the Taubjerg model for $q > 4$. Multichannel transition probabilities are computed via the recursive formula, and rate coefficients are obtained through Maxwell-Boltzmann thermal averaging over $1\text{--}10^5$ K. For low charge states ($q = 3\text{--}12$), the cross sections approximately follow an E^{-1} scaling below their characteristic turnover energies E_t and exhibit non-monotonic energy dependences at higher energies. The turnover energy generally shifts upward with increasing q . For $q \gtrsim 13$, no resolvable turnover is observed within the present energy range, and the cross sections approximately retain the E^{-1} scaling behavior over the whole calculated range. The charge state dependence of the cross sections reveals pronounced shell structure modulation. Systematic minima occur at closed-shell (d^{10} and f^{14}) and half filled shell (f^7) configurations, as exemplified by $q = 15, 33, 40$, and 65 . This behavior is attributed to exchange energy stabilization at these configurations, which produces anomalously high ionization energies, increases the energy defect, shifts the avoided crossing inward, and suppresses the electron capture probability. The thermally averaged rate coefficients preserve these shell-structure oscillations, and those for high charge states show an approximate $T^{-1/2}$ monotonic decrease. The present dataset covers temperature ranges relevant to kilonova ejecta ($10^3\text{--}10^4$ K), fusion edge plasmas ($10^4\text{--}10^5$ K), and accelerator beam pipes from room temperature to 10^3 K. It therefore provides systematic theoretical reference data for plasma modeling and beam transport design. The dataset presented in this paper is

Keywords: Charge transfer, Uranium ions, Collision cross section, Multi-Channel Landau-Zener method



录用稿件，非最终出版稿