

等离子体屏蔽效应对 $N^{7+}+H(1s)$ 电子俘获过程的影响*

戈迪¹⁾ 陈晨¹⁾⁴⁾ 赵国鹏^{1)4)†} 高俊文²⁾ 祁月盈¹⁾⁴⁾ 刘玲³⁾⁴⁾ 吴勇³⁾⁴⁾⁵⁾

1) (嘉兴大学机械工程学院, 嘉兴 314001)

2) (杭州师范大学物理学院, 杭州 311121)

3) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

4) (计算物理全国重点实验室, 北京 100088)

5) (北京大学, 应用物理与技术研究中心, 北京 100871)

摘要

本文采用双中心原子轨道强耦合方法和 Debye 屏蔽势, 系统研究了等离子体环境中碰撞能量在 0.5 - 200 keV/u 范围内 N^{7+} 离子与 $H(1s)$ 原子的电子俘获过程。结果表明, 碰撞能量低于约 5 keV/u 时, 俘获到 $4l$ 态的截面随屏蔽长度的减小呈现先增大后减小的变化趋势。这是由于屏蔽效应增强导致初末态的能级差减小, 强相互作用范围扩大, 在碰撞能量较低的情况下系统在该区域中停留的时间延长, 从而增加了跃迁概率。相比之下, $5l$ 态对应的能级差变化较小, 其俘获截面始终呈下降趋势。上述差异导致随着屏蔽效应的增强, 主要俘获通道由 $n = 5$ 转变为了 $n = 4$ 。此外, 本文还研究了等离子体屏蔽效应对电荷交换光谱线的影响。与无屏蔽情形相比, 所有谱线均发生红移, 且红移量随屏蔽长度减小而增大。谱线强度随屏蔽长度的变化呈现明显的碰撞能量依赖关系: 在较低碰撞能量下, $n = 4$ 的截面增大效应占主导, 低主量子数谱线强度随屏蔽效应增强而增大; 在较高碰撞能量下, $n = 4$ 的截面增大效应减弱, 仅 $n = 4$ 的谱线强度仍略有增大。本研究揭示了等离子体屏蔽效应对非对称碰撞系统中不同俘获通道竞争机制的调控作用, 相关结果可以为相关领域中的电荷交换光谱诊断提供理论依据。

关键词: 等离子体屏蔽, 电子俘获, 原子轨道强耦合方法

PACS: 52.20.-j, 34.70.+e

***基金:** 国家自然科学基金 (批准号: 12374229), 计算物理全国重点实验室 (批准号: SYSQN2024-05) 资助的课题。

† 通讯作者. E-mail: guopengzhao@zjxu.edu.cn

1 引言

等离子体中的重离子碰撞过程在天体物理以及约束聚变等领域具有重要应用^[1, 2]。包含碰撞过程在内的许多原子过程的反应时间远小于等离子体集体模式（例如振荡）的时间尺度^[3, 4]，相关研究工作中常采用 Debye 势^[5]、cos-Debye 势^[6, 7]、Friedel 势^[8]、SM 势^[9-11]、ASD 势^[12, 13]等屏蔽模型势描述等离子体中粒子间的相互作用。

等离子体屏蔽效应不仅能够减少碰撞系统中靶粒子和入射离子的束缚态数目，从而限制开放的反应通道数量，并且还会降低直接和交换耦合的强度。这些因素的共同作用通常导致电子俘获截面相比非屏蔽情况呈现减小的趋势^[14]。然而，不同碰撞系统由于电荷对称性的差异，屏蔽效应的影响还表现出许多不同的特征。对于对称系统^[14-20]，由于主要俘获通道的共振特性，其截面在屏蔽效应非常强之前，受到屏蔽效应的影响较小，导致总电子俘获截面相比非屏蔽情况，仅在碰撞能量较高的情况下显著减小，例如 Debye 等离子体中 $H^+ + H$ 碰撞系统^[15]在屏蔽长度小于 $4 a_0$ ，碰撞能量高于 80 keV/u 的情况下才能看到总电子俘获截面相比非屏蔽情况明显减小。对于非对称系统^[21-25]，一些非主要俘获通道的截面在较大的能量范围内出现大于非屏蔽情况下的截面的情况，例如 $He^{2+} + H$ 碰撞系统^[21]，在碰撞能量低于 25 keV/u 时，1s 态的俘获截面随屏蔽效应的增强有所增大，但在这一能量区域内，1s 态的俘获截面相比主要俘获通道小了几个数量级，因此其对总俘获截面的贡献几乎可以忽略，截面增强的实际影响非常有限。

对于非对称性较强的碰撞系统^[26, 27]，等离子体屏蔽效应对电子俘获过程的影响更为复杂且显著。Debye 等离子体中 $C^{6+} + H$ 碰撞系统的研究^[27]表明，非屏蔽情况下的主要俘获通道是 $n = 4$ ，其次是 $n = 5$ 。在低于约 50 keV/u 的能量区域，随着屏蔽效应的增强，低 n 通道即 $n = 3$ 的截面明显增大，但是在非屏蔽情况下

$n = 3$ 的截面相比 $n = 4$ 和 $n = 5$ 非常小，因此仅在屏蔽效应非常强（例如屏蔽长度为 $2.5 a_0$ ，对应 $4d$ 、 $4f$ 通道已关闭）时，才能出现 $n = 3$ 的截面超过 $n = 4$ 的情况。与此同时， $n = 4$ 的截面随屏蔽效应的增强先略有增大后呈减小趋势，而 $n = 5$ 的截面则始终呈减小趋势。因此，除了屏蔽效应非常强且部分主要俘获通道（ $n = 4$ 中的 $4d$ 、 $4f$ 态）关闭的情况外，屏蔽情况下的主要俘获通道仍然是 $n = 4$ 。在 $O^{8+} + H$ 系统^[26]中，非屏蔽情况下的主要俘获通道为 $n = 5$ ，其次为 $n = 6$ 。随着屏蔽效应的增强，低 n 通道即 $n = 4$ 的截面明显增大， $n = 5$ 的截面先略有增大后转为减小， $n = 6$ 的截面则始终呈减小趋势。但是与 $C^{6+} + H$ 类似，除了屏蔽效应非常强的情况外，主要俘获通道仍然是 $n = 5$ 。

综上所述，在非对称性较强的碰撞系统中，屏蔽效应能够增强某些原本对总截面贡献较小的低 n 俘获通道，但目前的研究结果表明除了屏蔽效应非常强的情况外，对总俘获截面贡献最大的通道仍然与非屏蔽情况一致。作为核对称性介于 $C^{6+} + H$ （ $n = 4$ 贡献最大，其次为 $n = 5$ ）和 $O^{8+} + H$ （ $n = 5$ 贡献最大，其次为 $n = 6$ ）之间的 $N^{7+} + H$ 碰撞系统，非屏蔽情况下^[28]的主要俘获通道为 $n = 5$ ，其次为 $n = 4$ 和 $n = 6$ ，是研究等离子体屏蔽效应影响不同俘获通道竞争关系的理想对象。本研究工作将采用双中心原子轨道强耦合（TC-AOCC）方法，在 $0.5\text{--}200 \text{ keV/u}$ 的碰撞能量范围内系统研究 Debye 等离子体中 $N^{7+} + H$ 碰撞系统的电子俘获过程： $N^{7+} + H(1s) \rightarrow N^{6+}(nl) + H^+$ ，进而分析屏蔽效应对 nl 态选择截面的影响，并重点研究对总俘获截面贡献最大的通道是否会因屏蔽效应发生改变。氮在磁约束聚变和天体等离子体中广泛存在，本研究结果可为相关领域的电荷交换光谱诊断提供理论依据^[29, 30]，并填补从 $C^{6+} + H$ 到 $O^{8+} + H$ 碰撞系统之间屏蔽效应系统研究的空白。

2 计算方法

本工作采用双中心原子轨道强耦合 (TC-AOCC) 方法研究 Debye 等离子体环境中的电子俘获过程, 关于 TC-AOCC 方法的详细介绍可以查阅相关文献^[31, 32]。等离子体环境中入射离子和靶粒子与活跃电子之间的相互作用势 $V_A(r_A; r_d)$ 和 $V_B(r_A; r_d)$ 采用 Debye 势, 其形式为

$$V(r, r_d) = -\frac{Ze^2}{r} \exp(-r/r_d) \quad (1)$$

其中 Z 是离子的核电荷数, $r_d = (k_B T_e / 4\pi e^2 n_e)^{1/2}$ 是 Debye 屏蔽长度, T_e 和 n_e 分别是等离子体的电子温度和密度, k_B 是玻尔兹曼常数。势(1)的适用条件为库仑耦合参数 $\Gamma = (4\pi e^6 n_e / 3)^{1/3} / (k_B T_e) < 1$ 。下文中如果不特别提及将采用原子单位。

基于直线轨迹近似, 碰撞系统的哈密顿量可以表示为

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_r^2 + V_A(r_A; r_d) + V_B(r_B; r_d) \quad (2)$$

结合涉及平面波电子平移因子的运动原子轨道, 总电子波函数的双中心形式为

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_i a_i(t) \phi_i^A(\vec{r}, t; r_d) + \sum_j b_j(t) \phi_j^B(\vec{r}, t; r_d) \quad (3)$$

$\phi_i^A(\vec{r}, t; r_d)$ 和 $\phi_j^B(\vec{r}, t; r_d)$ 是原子态, 其形式为

$$\phi_{nlm}(\vec{r}, r_d) = \sum_k c_{nk} \chi_{klm}(\vec{r}, r_d) \quad (4)$$

$\chi_{klm}(\vec{r}, r_d)$ 的形式为

$$\chi_{klm}(\vec{r}; r_d) = N(\xi_k(r_d)) r^l e^{-\xi_k(r_d)r} Y_{lm}(\vec{r}), \quad (5)$$

其中 $N(\xi_k(r_d))$, $Y_{lm}(\vec{r})$ 和 $\xi_k(r_d) = \alpha \beta^k$ ($k = 1, 2, \dots, N$) 分别是归一化常数, 球谐函数和变分参数。通过将单中心原子哈密顿量对角化, 可以得到线性系数 c_{nk} 和 nl 束缚态的能量 $E_{nl}(r_d)$ 。

将哈密顿量 (式 (2)) 和总电子波函数 (式 (3)) 代入含时薛定谔方程

$$\left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (6)$$

中, 可以得到耦合方程

$$i(\dot{A} + S\dot{B}) = HA + KB, \quad (7a)$$

$$i(\dot{B} + S^\dagger \dot{A}) = \bar{K}A + \bar{H}B. \quad (7b)$$

上式中 A 和 B 分别代指振幅 $a_i(t)$ 和 $b_j(t)$, S 是重叠矩阵 ($S^\dagger$ 为其转置形式), H 和 $\bar{H}$ 是直接耦合矩阵, K 和 $\bar{K}$ 是电子交换矩阵。式 (7) 可以通过初始条件

$$a_i(-\infty) = \delta_{ii}, \quad b_j(-\infty) = 0, \quad (8)$$

进行求解。末态 j 的分截面

$$\sigma_{cx,j} = 2\pi \int_0^\infty |b_j(+\infty)|^2 b db \quad (9)$$

求和可以得到总电子俘获截面, 其中 b 是碰撞参数。计算中采用的靶的基组中包含所有 $n \leq 2$ 的束缚态 (共计 10 个态), 入射离子的基组中包含所有 $n \leq 7$ 的束缚态 (共计 84 个态), 本工作所用基组的收敛性已经通过改变基组大小, 并对比非屏蔽和屏蔽情况下的结果进行了验证。

3 计算结果与分析

3.1 临界屏蔽长度

Debye屏蔽势 (式 (1)) 在 $r \rightarrow \infty$ 时的下降速度快于 $-r^{-2}$, 即对于任意确定的屏蔽长度 r_d , 式 (1) 仅能支持有限数量的束缚态^[33], 从而影响碰撞反应通道的数量。Debye势屏蔽强度随屏蔽长度 r_d 的减小而增强, 因此 nl 束缚态的能量随屏蔽长度 r_d 的减小将逐渐降低, 直至进入连续态, 此时对应的是临界屏蔽长度。表1给出了 N^{6+} 离子 $n \leq 7$ 的临界屏蔽长度 $r_{d,c}^{nl}$ (单位 a_0)。

表 1. N^{6+} 离子 $n \leq 7$ 的临界屏蔽长度 $r_{d,c}^{nl}$ (单位 a_0)。

Table 1. Values of critical screening length $r_{d,c}^{nl}$ (in units of a_0) for N^{6+} ions for $n \leq 7$.

$n \backslash l$	s	p	d	f	g	h	i
1	0.12045						
2	0.46445	0.64875					
3	1.03863	1.26766	1.56394				
4	1.84902	2.10588	2.45885	2.86685			
5	2.90544	3.16964	3.57272	4.03688	4.55784		
6	4.22428	4.47275	4.92756	5.42379	6.00409	6.63720	
7	5.86057	6.04621	6.61196	7.04925	7.69089	8.36687	9.10548

3.2 电子俘获截面

图1给出了非屏蔽和固定不同屏蔽长度的屏蔽情况下, $n \leq 7$ 的态选择俘获截面和总截面随碰撞能量的变化关系, 其中图 (a) 对应非屏蔽情况, 图 (b)、(c) 和 (d) 分别对应屏蔽长度 r_d 为 12、6 和 4.5 a_0 的屏蔽情况。根据表1可以知道, 对于 N^{6+} 离子, $r_d = 12 a_0$ 时所有 $n \leq 7$ 的轨道都是束缚态, $r_d = 6 a_0$ 时所有 $n \leq 5$ 以及 6s、6p、6d、6f 和 7s 轨道是束缚态, 而 $r_d = 4.5 a_0$ 时仅有 $n \leq 4$ 以及 5s、5p、5d、5f、6s 和 6p 轨道是束缚态。从图1中可以看出, 随着屏蔽长度减小, 屏蔽效应增强, $n \leq 3$ 的态选择截面由于相比其它截面贡献较小, 看不到显著的变化; $n \geq 5$ 的态选择截面呈现出逐渐减小的趋势, 由于 $r_d = 4.5 a_0$ 时 N^{6+} 离子所有 $n = 7$ 的束缚态都已经进入连续态, 图1 (d) 中已经不存在 $n = 7$ 对应的态选择截面; 而 $n = 4$ 对应的态选择截面呈现出逐渐增大的趋势, 这种趋势在低能区域尤其显著。上述变化规律导致碰撞能量小于约 1 keV/u 时, 在开放通道数量较少的情况下, 图1 (d) 中 $r_d = 4.5 a_0$ 对应的总截面反而比图1 (b) 和 (c) 中的总截面更大。尤其值得关

注的是，非屏蔽情况下 $n = 5$ 对应的截面贡献最大（如图1（a）所示），而在等离子体环境中，随着屏蔽长度的减小， $n = 4$ 的截面贡献逐渐接近并超过了 $n = 5$ （如图1（b）、（c）和（d）所示），即随着屏蔽效应的增强，主要俘获通道从 $n = 5$ 逐渐转变为了 $n = 4$ 。

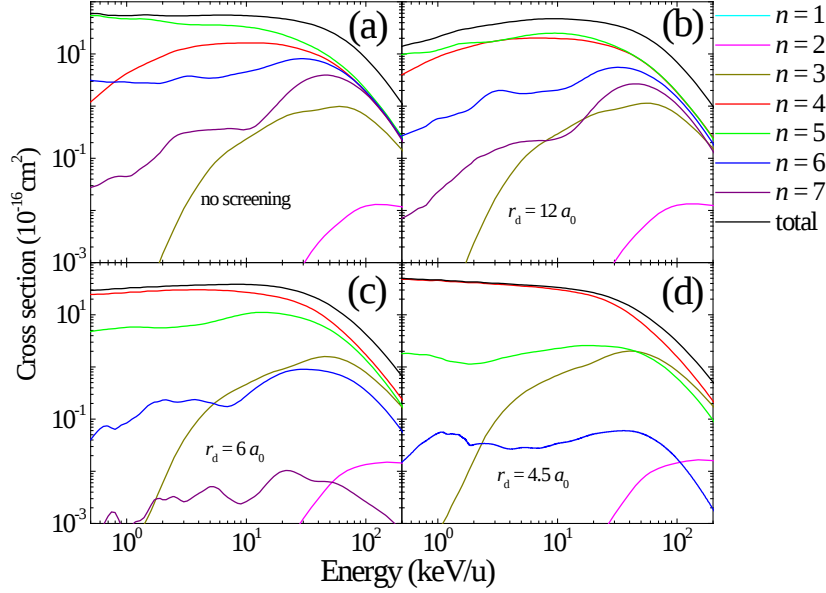


图 1（a）非屏蔽和屏蔽环境中（b） $r_d = 12$ ，（c） $r_d = 6$ 和（d） $r_d = 4.5 a_0$ 的总截面和电子俘获到 $n \leq 7$ 的态选择截面随碰撞能量的变化关系。

Fig. 1. Energy dependence of total and state selective cross sections for electron capture to n -states, $n \leq 7$, for the (a) unscreened case and screened cases with screening length (b) $r_d = 12$, (c) $r_d = 6$ and (d) $r_d = 4.5 a_0$.

为了更细致的研究等离子体屏蔽效应对电子俘获截面的影响，图2和图3分别展示了非屏蔽和固定屏蔽长度的屏蔽情况下，俘获到通道4I和5I的态选择截面随碰撞能量的变化关系。根据图2（a）可以发现，非屏蔽情况下所有4I态俘获截面随碰撞能量的增大都呈现出先增大后减小的趋势，并且截面达到峰值时对应的碰撞能量值随 l 的增大而增大。对于屏蔽情况，当 $r_d = 12 a_0$ 时（如图2（b）），与图2（a）展示的非屏蔽情况相比，其截面随碰撞能量的变化趋势类似，但低能区域的截面大小显著增大。当 $r_d = 6 a_0$ 时（如图2（c）），低能区域的截面大小

进一步增大，导致截面随碰撞能量的变化趋势也发生了显著变化，即随着碰撞能量的增大，4s、4p、4d对应的截面在低能区域几乎保持不变，分别达到约3、4、10 keV/u后开始出现明显的减小趋势，4f对应的截面仍然是先增大后减小。当 $r_d = 4.5 a_0$ 时（如图2（d）），与 $r_d = 6 a_0$ 的情况相比，4d、4f对应的截面变化较小，4s、4p对应的截面在低能区域显著增大，随着碰撞能量的增大呈现单调减小的趋势。

图3中呈现了与图2相同环境下俘获到5l轨道的情况。与图3（a）中的非屏蔽情况相比，图3（b）中 $r_d = 12 a_0$ 时，小于约2 keV/u的低能区域的截面大小显著减小；随碰撞能量的增大，5s、5p、5d对应的截面仍然呈现逐渐减小的趋势，而5g和5f对应的截面则变为先增大后减小。相比图3（b），图3（c）中 $r_d = 6 a_0$ 时的截面大小进一步减小，并且出现显著变化的能量范围从小于约2 keV/u拓展到了小于约10 keV/u。当 $r_d = 4.5 a_0$ 时，由于 N^{6+} 离子的5g态已经进入连续态，图3（d）中已经不存在5g通道，其它截面结果与图3（c）相比变化较小。

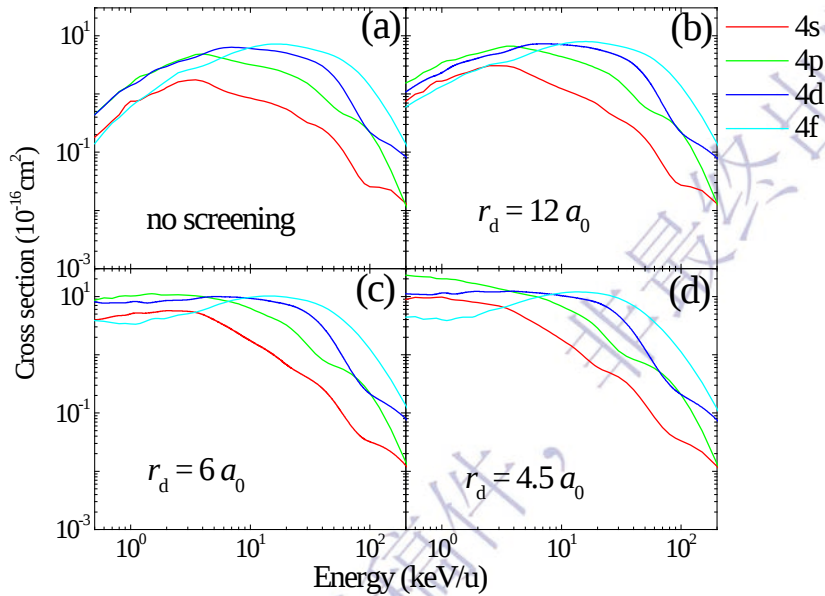


图2 （a）非屏蔽和屏蔽环境中（b） $r_d = 12$ ，（c） $r_d = 6$ 和（d） $r_d = 4.5 a_0$ 的电子俘获到4l的态选择截面随碰撞能量的变化关系。

Fig. 2. Energy dependence of state selective cross sections for electron capture to 4l-states, for the

(a) unscreened case and screened cases with screening length (b) $r_d = 12$, (c) $r_d = 6$ and (d) $r_d = 4.5$ a_0 .

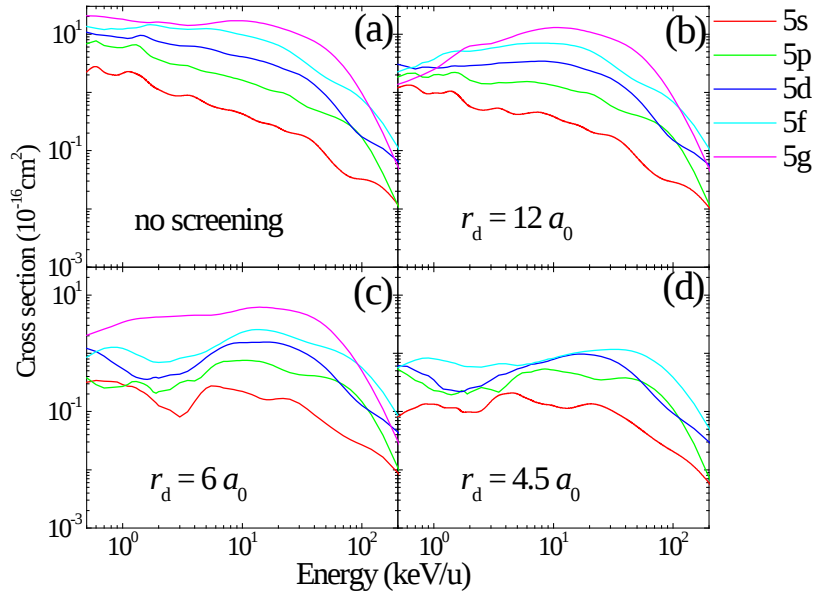


图3 (a) 非屏蔽和屏蔽环境中 (b) $r_d = 12$, (c) $r_d = 6$ 和 (d) $r_d = 4.5a_0$ 的电子俘获到 $5l$ 的态选择截面随碰撞能量的变化关系。

Fig. 3. Energy dependence of state selective cross sections for electron capture to $5l$ -states, for the (a) unscreened case and screened cases with screening length (b) $r_d = 12$, (c) $r_d = 6$ and (d) $r_d = 4.5$ a_0 .

为了进一步分析屏蔽强度的变化对电子俘获截面的影响，图4和图5分别展示了固定碰撞能量时，俘获到通道 $4l$ 和 $5l$ 的态选择截面随屏蔽长度的变化关系，图 (a)、(b)、(c) 和 (d) 对应的碰撞能量分别为 0.5、2、5 和 50 keV/u。结果显示，随着碰撞能量的增大，角动量 l 越大，对应的截面贡献越大。随着屏蔽长度的减小，当 N^{6+} 离子的某个 $4l$ 或 $5l$ 态进入连续态时，对应反应通道的碰撞截面将趋向于 0，这也是图4和图5中 $n = 4$ 和 $n = 5$ 的总截面对应的黑线出现阶梯结构的原因。

一般情况下，随着屏蔽强度的增强，直接和交换耦合的强度减小，从而使对应的电子俘获截面随屏蔽长度的减小而减小。但是，当碰撞能量小于 5

keV/u时，随着屏蔽长度的减小，图4所示的各个俘获到4l态的截面先增大后减小，并且碰撞能量越小趋势越明显，峰值位置出现在 $r_d = 4 a_0$ 附近。

分析发现这与H原子的1s态与 N^{6+} 离子的nl态（ $n = 4, 5$ ）之间的能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 随着等离子体环境的变化有关。能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 随屏蔽长度的变化关系如图6所示，随着屏蔽长度 r_d 的减小，能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 逐渐减小，并且在减小到0之后转变了正负号，而 $n = 4$ 和5对应的 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 接近0的屏蔽长度 r_d 分别在4和10附近，这与图4中截面的峰值位置相符。因此，正是由于初末态的强相互作用范围随能级差的减小而增大， $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 为0时碰撞过程的初末态处于能量共振状态，在相对碰撞能量较低的情况下，系统会在这个相互作用区域中停留更长时间，从而导致跃迁概率增加，碰撞截面增大。图5中俘获到5l态的截面在不同的碰撞能量下随屏蔽长度的减小都始终保持整体下降的趋势，是由于相比 $n = 4$ 的情况， $n = 5$ 对应的能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 的变化量较小，不足以超过直接和交换耦合的强度的减小对俘获截面的影响。

将上述结果与 $C^{6+} + H$ 和 $O^{8+} + H$ 系统^[26, 27]的研究进行对比，可以发现等离子体屏蔽效应对不同核电荷数碰撞系统的影响呈现出系统性规律。在 $C^{6+} + H$ （ $Z = 6$ ）中，非屏蔽情况的主要俘获通道为 $n = 4$ ，其截面随屏蔽效应增强先略有增大后减小， $n = 5$ 的截面则持续减小；在 $O^{8+} + H$ （ $Z = 8$ ）中，非屏蔽情况的主要俘获通道为 $n = 5$ ，随屏蔽效应增强， $n = 4$ 的截面明显增大但不足以改变主要俘获通道， $n = 5$ 的截面先增后减， $n = 6$ 的截面持续减小。本工作表明， $N^{7+} + H$ （ $Z = 7$ ）的非屏蔽情况的主要俘获通道为 $n = 5$ ，由于能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 随屏蔽效应增强而显著减小并趋于共振（图6）， $n = 4$ 的俘获截面获得足够大的增强，使得主要俘获通道从 $n = 5$ 转变为 $n = 4$ （图1）。这三个碰撞系统之间差异的物理根源在于：随着核电荷数 Z 的增大，非屏蔽情况下主要俘获通道对应的主量子数 n 逐渐

增大，而屏蔽效应倾向于增强低 n 通道， N^{7+} ($Z = 7$) 恰好处于两者竞争的临界区域，因此观察到了主要俘获通道的转变。

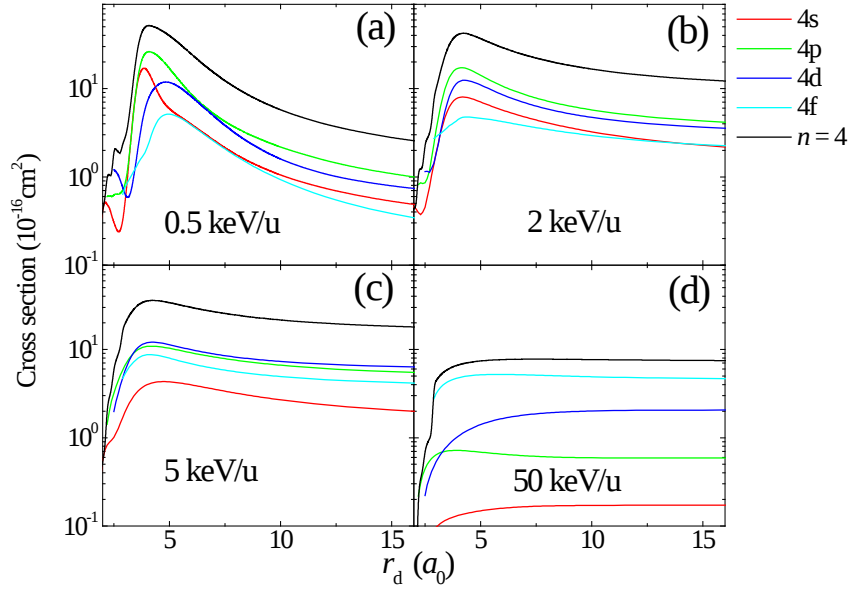


图 4 分别固定碰撞能量 (a) 0.5 keV/u, (b) 2 keV/u, (c) 5 keV/u 和 (d) 50 keV/u 时，电子俘获到 4l 态的截面随屏蔽长度 r_d 的变化关系。

Fig. 4. State selective cross sections for electron capture to 4l-states as a function of screening length r_d , at fixed collision energies of (a) 0.5 keV/u, (b) 2 keV/u, (c) 5 keV/u and (d) 50 keV/u.

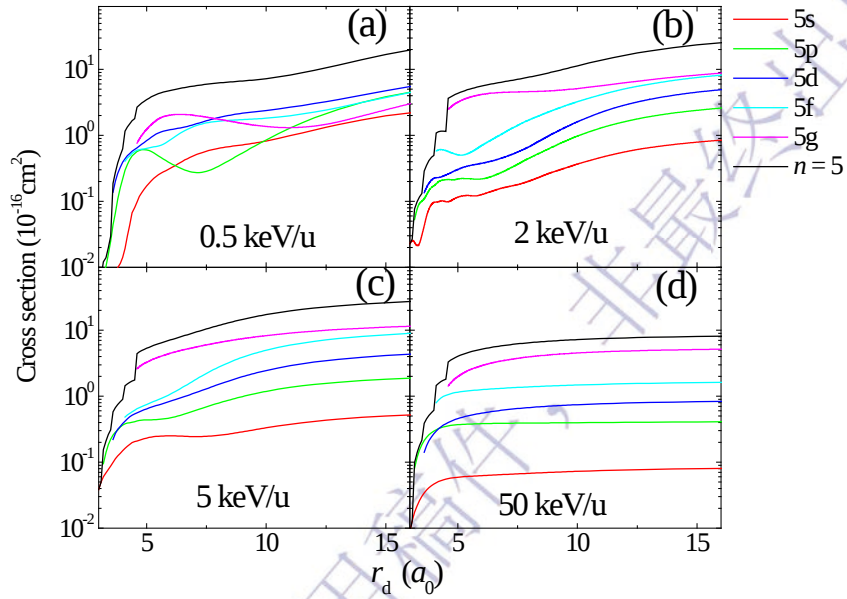


图 5 分别固定碰撞能量 (a) 0.5 keV/u, (b) 2 keV/u, (c) 5 keV/u 和 (d) 50 keV/u 时，电子俘获到 5l 态的截面随屏蔽长度 r_d 的变化关系。

Fig. 5. State selective cross sections for electron capture to 5*l*-states as a function of screening length r_d , at fixed collision energies of (a) 0.5 keV/u, (b) 2 keV/u, (c) 5 keV/u and (d) 50 keV/u.

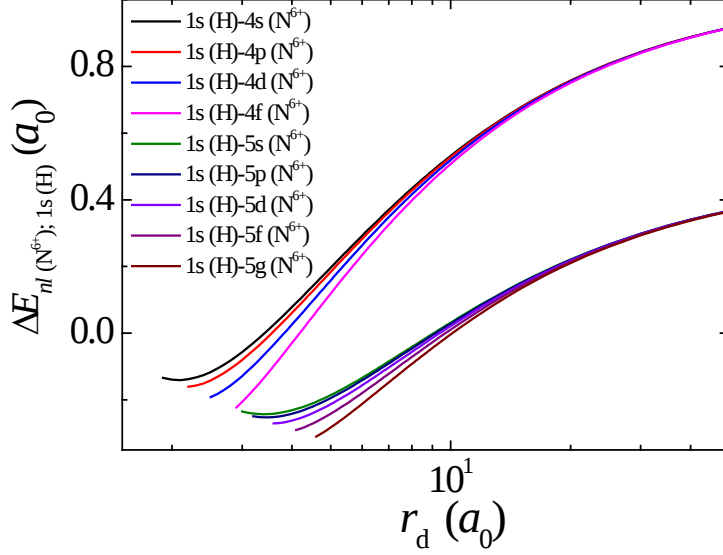


图 6 能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+}); 1s(H)}$ ($n = 4, 5$) 随屏蔽长度 r_d 的变化关系。

Fig. 6. Energy difference $\Delta E_{nl(N^{6+}); 1s(H)}$ ($n = 4, 5$) as a function of screening length r_d .

3.3 电荷交换谱线

电子俘获过程所布居的离子态辐射是高温稠密等离子体中重要的辐射损失机制，接下来进一步研究等离子体屏蔽效应对电荷交换谱线的影响。假设 N^{6+} 离子激发态的布局完全由电子俘获过程决定，对于 $nl \rightarrow n'l'$ 跃迁，每秒每立方厘米辐射的光子数可以表示为：

$$N_{nl, n'l'}^v = N^{N^{7+}} N^H v B_{nl, n'l'} \left(\sigma_{nl} + \sum_{n'' > n} C_{n''l'', nl} \sigma_{n''l''} \right), \quad (10)$$

其中 $N^{N^{7+}}$ 是 N^{7+} 离子的数密度， N^H 是氢原子的数密度， v 是碰撞速度， $C_{n''l'', nl}$ 是级联矩阵， $B_{nl, n'l'} = A_{nl, n'l'} / \sum_{n'' < n} A_{nl, n''l''}$ 。辐射跃迁概率 $A_{nl, n'l'}$ 可以通过 Debye 势的波函数计算得到。忽略展宽的具体细节并假设谱线具有高斯线形，展宽为任意值 Γ ，则约化谱线强度可以定义为：

$$I_{nl \rightarrow n'l'}^v(E_v) = \left[N_{nl \rightarrow n'l'}^v / (N^{N^{7+}} N^H) \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi\Gamma}} \exp\left(-\frac{(E_v - E_{v_0})^2}{\Gamma^2}\right), \quad (11)$$

其中 $E_{v_0} (= \Delta E_{nl, n'l'})$ 是跃迁能量， E_v 是辐射光子的能量。

图7 (a) 和 (b) 分别给出了碰撞能量为0.5和5keV/u时，非屏蔽和不同屏蔽长度的屏蔽情况下，电子俘获过程得到的 N^{6+} 离子莱曼系列谱线的约化强度。图中线移呈现明显的规律：与非屏蔽情况相比，所有 $np \rightarrow 1s$ 跃迁谱线均发生红移，并且红移量随屏蔽长度 r_d 的减小而增大。这是由于等离子体屏蔽效应使 N^{6+} 离子不同主量子数束缚态（包括 np 与 $1s$ 态）之间的能级差随 r_d 的减小而减小。

谱线强度不仅取决于直接布居辐射态 nl 的俘获截面，还取决于能量高于 nl 的态 $n''l''$ 的俘获截面（这些态通过辐射级联布居 nl 态），因此强度随 r_d 的变化较为复杂。在图7 (a) 所示的 0.5 keV/u 碰撞能量下，随屏蔽长度 r_d 的减小， $2p \rightarrow 1s$ 、 $3p \rightarrow 1s$ 和 $4p \rightarrow 1s$ 跃迁的谱线强度逐渐增大，而 $5p \rightarrow 1s$ 跃迁的谱线强度逐渐减小。这与图1所示的该碰撞能量下俘获到 $n = 4$ 和 $n = 5$ 的截面大小随屏蔽长度的变化趋势一致：随屏蔽增强，俘获到 $n = 4$ 的截面增大，既直接增大了 $4p$ 的布居，也通过级联贡献增大了 $3p$ 和 $2p$ 的布居；而俘获到 $n > 4$ 的截面均减小，导致 $5p$ 布居下降。

在图7 (b) 所示的 5 keV/u 碰撞能量下，随屏蔽长度 r_d 的减小，仅 $4p \rightarrow 1s$ 跃迁的谱线强度仍然呈现逐渐增大的变化趋势， $3p \rightarrow 1s$ 跃迁的谱线强度几乎不变， $2p \rightarrow 1s$ 和 $5p \rightarrow 1s$ 跃迁的谱线强度呈现逐渐减小的变化趋势。原因是该能量下，高 n 态 ($n > 4$) 的俘获截面随屏蔽增强显著下降，导致通过级联向 $2p$ 、 $3p$ 的贡献大幅减少。虽然 $4p$ 直接俘获截面增大，但 $3p$ 的直接俘获截面增幅有限，且来自 $4d$ 和 $4f$ 等态的级联贡献减少，两者抵消后 $3p \rightarrow 1s$ 的强度几乎不变； $2p \rightarrow 1s$ 几乎完全依赖级联贡献，因此强度反而降低。

图8给出了与图7相同的等离子体环境和碰撞能量下，电子俘获过程产生的

N^{6+} 离子巴耳末 ($nd \rightarrow 2p$) 系列谱线的约化强度。随屏蔽长度的变化, 图8呈现出与图7相似的规律, 其背后的物理机制亦相同。

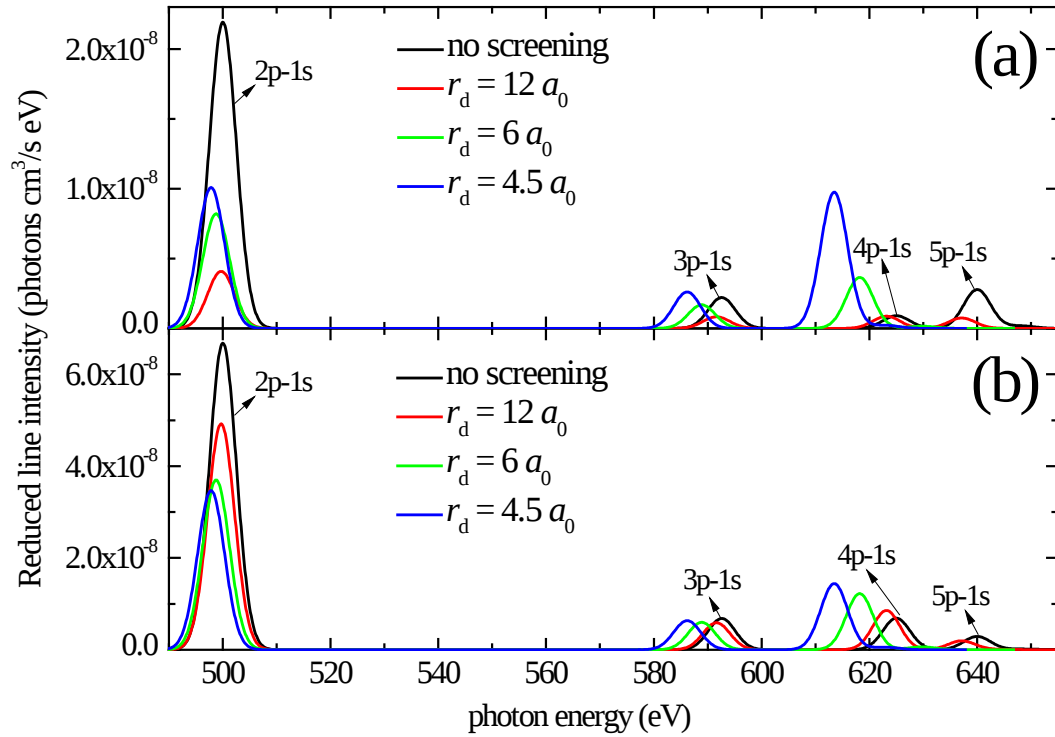


图 7 在碰撞能量为 (a) 0.5 keV/u 和 (b) 5 keV/u 时, 非屏蔽和屏蔽长度 $r_d=12, 6$ 和 $4.5 a_0$ 的屏蔽情况下, 电子俘获过程产生的 N^{6+} 离子的莱曼系列谱线。

Fig. 7. Lyman line series of the N^{6+} ion produced by electron capture at collision energies of (a) 0.5 keV/u and (b) 5 keV/u for the unscreened and screened cases with $r_d = 12, 6$ and $4.5 a_0$.

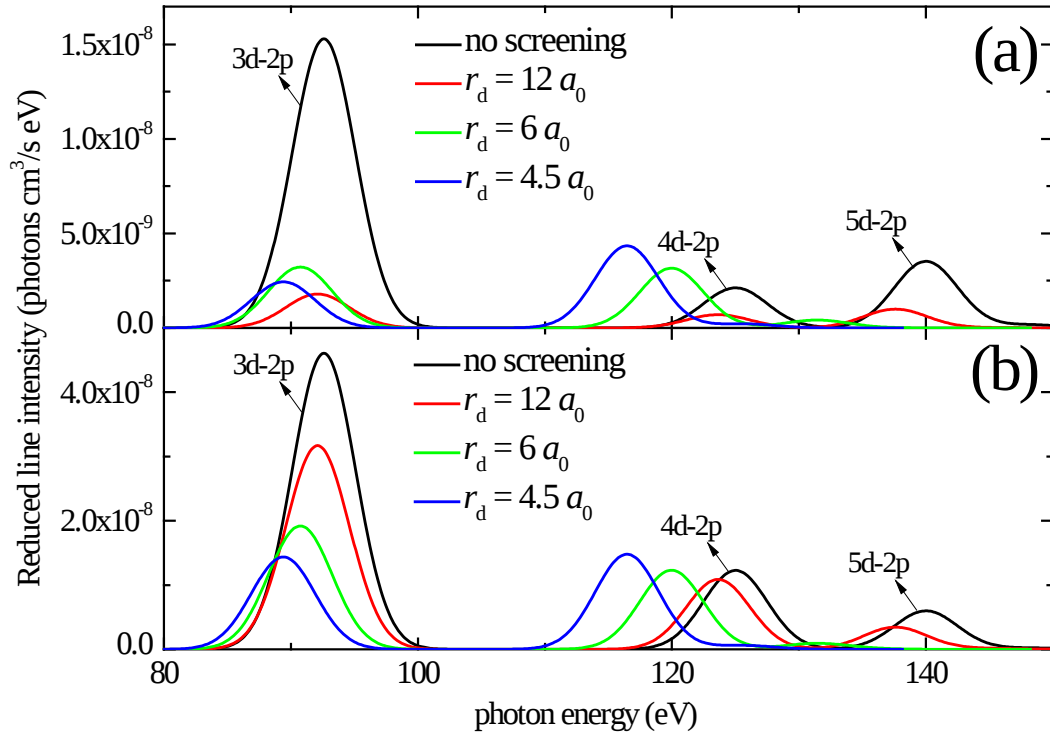


图 8 在碰撞能量为 (a) 0.5 keV/u 和 (b) 5 keV/u 时，非屏蔽和屏蔽长度 $r_d=12, 6$ 和 $4.5 a_0$ 的屏蔽情况下，电子俘获过程产生的 N^{6+} 离子的巴耳末 ($nd \rightarrow 2p$) 系列谱线。

Fig. 8. Balmer ($nd \rightarrow 2p$) line series of the N^{6+} ion produced by electron capture at collision energies of (a) 0.5 keV/u and (b) 5 keV/u for the unscreened and screened cases with $r_d = 12, 6$ and $4.5 a_0$.

4 结 论

本工作采用双中心原子轨道强耦合 (TC-AOCC) 方法和 Debye 屏蔽势，在 0.5-200 keV/u 的碰撞能量范围内，研究了等离子体环境中 N^{7+} 离子与 H 原子碰撞的电子俘获过程。计算中采用的靶的基组中包含所有 $n \leq 2$ 的束缚态 (共计 10 个态)，入射离子的基组中包含所有 $n \leq 7$ 的束缚态 (共计 84 个态)。

一般情况下，由于直接和交换耦合的强度随屏蔽强度的增强而减小，使得对应的电子俘获截面随屏蔽长度的减小而减小。然而，本工作的计算结果表明，碰撞能量小于约 5 keV/u 时，俘获到 $n = 4$ 的态选择截面随屏蔽长度的减小表现出先增大后减小的变化趋势。出现上述现象的原因是由于初末俘获态的能级差

$\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 随屏蔽强度的增强而减小，直至减小到 0，此时初末态处于能量共振状态。初末态的强相互作用范围随能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 的减小而增大，在相对碰撞能量较低的情况下，系统会在这个相互作用区域中停留更长时间，从而导致跃迁概率增加。非屏蔽情况下 $n = 5$ 是主要俘获通道，而俘获到 $5l$ 态的截面在不同的碰撞能量下随屏蔽长度的减小都始终保持整体下降的趋势，这是由于 $n = 5$ 时能级差 $\Delta E_{nl(N^{6+});1s(H)}$ 的变化量较小，不足以超过直接和交换耦合的强度的减小对俘获截面的影响。上述俘获到 $n = 4$ 和 $n = 5$ 的态选择截面随屏蔽长度的变化表现出的不同特性，导致随着屏蔽效应的增强，主要俘获通道从 $n = 5$ 逐渐转变为了 $n = 4$ 。对比 $C^{6+} + H$ 和 $O^{8+} + H$ 系统^[26, 27]的结果，发现随着核电荷数 Z 的增大，非屏蔽情况下主要俘获通道对应的主量子数 n 逐渐增大，而屏蔽效应倾向于增强低 n 通道，这个两个因素共同决定了主要俘获通道能否因屏蔽效应发生转变。

本文还研究了等离子体屏蔽效应对电荷交换光谱线性质的影响。与非屏蔽情况相比，所有谱线均发生红移，且红移量随屏蔽长度 r_d 的减小而增大。谱线强度不仅取决于直接俘获截面，还强烈依赖于来自更高激发态的级联贡献，因此其随屏蔽长度的变化呈现出复杂的碰撞能量依赖关系。对于莱曼系谱线，在较低的碰撞能量（0.5 keV/u）下， $n = 4$ 的截面增大效应占主导，低主量子数谱线（ $n = 2, 3, 4$ ）强度随屏蔽增强而增大，而 $n = 5$ 的谱线强度减小；在较高的碰撞能量（5 keV/u）下， $n = 4$ 的截面增大效应减弱，而高 n 态级联贡献进一步减小，此时仅 $n = 4$ 的谱线强度仍略有增大。巴耳末系谱线呈现相似的变化规律。

另外，根据计算结果还可以发现随着屏蔽长度的减小，一些俘获通道消失了，这是由于屏蔽势作为衰减速度快于 $-1/r^2$ 的短程势，其屏蔽长度确定时仅能支持有限数量的束缚态。

参考文献

- [1] Kurban A, Zhou X, Wang N, Huang Y F, Wang Y B, Nurmatamat N 2024 *Astrophys. J.* **974** 100
- [2] Tolstikhina I Y, Shevelko V P 2023 *Matter Radiat. Extrem.* **8** 044403
- [3] Zhao G P, Liu L, Wang J G, Janev R K, Yan J 2018 *Matter Radiat. Extrem.* **3** 300
- [4] Zhao G P, Chen C, Liu L, Chen Z B, Qi Y Y, Wang J G 2022 *Phys. Plasmas* **29** 053301
- [5] Ge D, Zhao G P, Qi Y Y, Chen C, Gao J W, Hou H S 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 083201 (in Chinese) [戈迪, 赵国鹏, 祁月盈, 陈晨, 高俊文, 侯红生 2024 物理学报 **73** 083201]
- [6] Shukla P K, Eliasson B 2008 *Phys. Lett. A* **372** 2897
- [7] Dong T, Zhang Y Z, Liu A H, Ho Y K, Jiao L G 2024 *Phys. Plasmas* **31** 082118
- [8] Zhao G P, Qi Y Y, Liu L, Wang J G, Janev R K 2019 *Phys. Plasmas* **26** 063509
- [9] Stanton L G, Murillo M S 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033104
- [10] Li X F, Zhu X L, Jiang G 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 073102 (in Chinese) [李向富, 朱晓禄, 蒋刚 2023 物理学报 **72** 073102]
- [11] Chen C, Zhao G P, Chen Z B, Qi Y Y, Liu L, Wu Y, Wang J G 2023 *Phys. Plasmas* **30** 123503
- [12] Zhou F Y, Qu Y Z, Gao J W, Ma Y L, Wu Y, Wang J G 2021 *Commun. Phys.* **4** 1
- [13] Lu S M, Zhou F Y, Gao X, Wu Y, Wang J G 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 113202 (in Chinese) [路思梅, 周福阳, 高翔, 吴勇, 王建国 2025 物理学报 **74** 113202]
- [14] Liu L, Wang J G, Janev R K 2009 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 105206
- [15] Zeng S L, Liu L, Wang J G, Janev R K 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 135202
- [16] Wu Y, Wang J G, Krstic P S, Janev R K 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 201003
- [17] Bhattacharya A, Kamali M Z M, Ghoshal A, Ratnavelu K 2015 *Phys. Plasmas* **22** 023512
- [18] Jakimovski D, Markovska N, Janev R K 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 205701
- [19] Zhao G P, Liu L, Wang J G, Janev R K 2017 *Phys. Plasmas* **24** 103504
- [20] Das K, Das B, Rej P, Ghoshal A 2021 *Contrib. Plasma Phys.* **61** e202000212
- [21] Liu L, Wang J G, Janev R K 2008 *Phys. Rev. A* **77** 032709
- [22] Zhang Y, Liu C H, Wu Y, Wang J G, Qu Y Z, Yan J 2010 *Phys. Rev. A* **82** 052706

- [23] Raportaru M C, Barandovski L, Stojanov N, Jakimovski D 2018 *Rom. Rep. Phys.* **70** 203
- [24] Jakimovski D, Janev R K 2018 *Eur. Phys. J. D* **72** 1
- [25] Chen C, Zhao G P, Qi Y Y, Liu L, Chen Z B, Wang J G 2022 *Phys. Plasmas* **29** 073501
- [26] Liu L, Wang J G, Janev R K 2009 *Phys. Rev. A* **79** 052702
- [27] Jakimovski D, Liu L, Wang J G, Janev R K 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 165202
- [28] Igenbergs K, Schweinzer J, Veiter A, Perneczky L, Frühwirth E, Wallerberger M, Watanabe A, Das T, Hlavenka P, Aumayr F 2012 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 065203
- [29] Isler R C 1994 *Plasma Phys. Control. Fusion* **36** 171
- [30] Lin X H, Lin M J, Wang K, Wu Y, Ren Y, Wang Y, Li J W 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 152501 (in Chinese) [林晓贺, 林敏娟, 王堃, 吴勇, 任元, 王瑜, 李婕维 2025 物理学报 **74** 152501]
- [31] Fritsch W, Lin C D 1991 *Phys. Rep.* **202** 1
- [32] Bransden B H, McDowell M R C 1992 *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions* (Oxford: Clarendon)
- [33] Landau L D, Lifshitz E M 1958 *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (London: Pergamon)

Effect of plasma screening on the electron capture process in $N^{7+} + H(1s)$ collisions*

GE Di¹⁾ CHEN Chen^{1) 4)} ZHAO Guopeng^{1) 4)†} GAO Jun-Wen²⁾ QI Yue-Ying^{1) 4)} LIU Ling^{3) 4)} WU

Yong^{3) 4) 5)}

1) (*College of Mechanical Engineering, Jiaxing University, Jiaxing 314001, China*)

2) (*School of Physics, Hangzhou Normal University, Hangzhou 311121, China*)

3) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

4) (*National Key Laboratory of Computational Physics, Beijing 100088, China*)

5) (*Center for Applied Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China*)

Abstract

The electron capture process in $N^{7+} + H(1s)$ collisions in a plasma environment is systematically investigated using the two-center atomic orbital close-coupling method and the Debye screening potential, for collision energies ranging from 0.5 to 200 keV/u. The results indicate that for collision energies below approximately 5 keV/u, the cross section for capture into the $4l$ states first increases and then decreases as the screening length decreases. This non-monotonic behavior arises because enhanced screening strength reduces the energy gap between the initial and final states, thereby enlarging the region of strong interaction, and at lower collision energies, the system resides in this interaction region for a longer duration, leading to an increased transition probability. In contrast, the energy differences for the $5l$ states change only slightly with

increasing screening strength, and its cross section exhibits a monotonic decline under the screening effect. Consequently, as screening intensifies, the dominant capture channel shifts from $n = 5$ to $n = 4$. By comparing the present results with previous studies on $C^{6+} + H$ ($Z = 6$) and $O^{8+} + H$ ($Z = 8$) systems, a systematic trend emerges: as the projectile nuclear charge Z increases, the dominant capture channel in the unscreened case moves to higher principal quantum numbers n , whereas the plasma screening effect tends to enhance the lower- n channels. The N^{7+} system ($Z = 7$) lies exactly in the critical region where these two competing factors cross, which explains why the dominant channel switching is observed in this system.

In addition, the effect of plasma screening on charge exchange spectral lines is investigated. Compared with the unscreened case, all spectral lines are redshifted, and the redshift magnitude increases with decreasing screening length. The spectral line intensities exhibit a clear dependence on collision energy as the screening length varies: at lower collision energies, the enhancement of the $n = 4$ capture cross section dominates, and the intensities of low- n spectral lines increase with increasing screening strength; at higher collision energies, this enhancement weakens, and only the $n = 4$ spectral lines show a slight increase in intensity. This work reveals the modulation mechanism of the plasma screening effect on the competition among different capture channels in asymmetric collision systems, and the findings provide a theoretical basis for charge exchange spectroscopic diagnostics in related fields.

Keywords: plasma screening, electron capture, atomic orbital close-coupling method

PACS: 52. 20. -j, 34.70. +e

*Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12374229) and
Foundation of National Key Laboratory of Computational Physics (No. SYSQN2024-05)

† Corresponding author. E-mail: guopengzhao@zjxu.edu.cn

录用稿件，非最终出版稿