

专题: 极端条件原子分子动力学

相对论扭曲波方法研究电子与原子碰撞激发过程*

李文博 李兵兵 陈浩 颌录有 武中文

丁晓彬 张登红 蒋军† 董晨钟‡

(西北师范大学物理与电子工程学院, 甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 兰州 730070)

(2024 年 10 月 20 日收到; 2024 年 12 月 2 日收到修改稿)

相对论扭曲波方法是研究微观粒子碰撞动力学过程的常用理论方法. 本文基于多组态 Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) 方法以及相应的程序包 GRASP 92/2K/2018 和 RATIP, 发展了一套电子与原子碰撞激发过程的全相对论扭曲波方法和程序. 计算了极化电子与原子碰撞激发过程的总截面、微分截面、态多极以及碰撞激发后辐射光子的积分和微分 Stokes 参数等. 讨论了电子关联效应、Breit 相互作用和等离子体屏蔽效应对碰撞激发截面的影响. 该方法和程序的发展为详细研究复杂靶离子的碰撞激发过程和讨论电子关联效应以及 Breit 相互作用对碰撞激发过程的影响提供了条件.

关键词: 电子与原子碰撞激发, 相对论扭曲波方法, 多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法

PACS: 34.80.Dp, 34.50.Fa

DOI: 10.7498/aps.74.20241467

CSTR: 32037.14.aps.74.20241467

1 引言

电子与原子(离子)碰撞激发(electron impact excitation)是最常见的微观粒子非弹性散射过程, 主要包括直接碰撞激发和间接碰撞激发^[1-8]. 直接碰撞激发是指原子直接吸收入射电子的能量从一个态激发到另一个高激发态的过程, 该过程中原子吸收的能量等于入射电子减少的能量^[4,5]. 间接碰撞激发又称为共振激发, 根据独立过程近似, 间接碰撞激发被视为一个两步过程: 靶原子中的电子首先吸收入射电子的能量跃迁至激发态, 同时入射电子被俘获至束缚态而形成中间双激发态, 中间双激发态再通过自电离跃迁到较低激发态^[6-8]. 值得注意的是, 间接碰撞激发与直接碰撞激发的初态和末态可以相同, 这两个过程会同时发生.

电子与原子(离子)的碰撞激发、电离和复合过程是天体、实验室和聚变等离子体中最为重要的碰撞动力学过程^[9-25]. 高精度的碰撞截面和速率系数在等离子体状态的诊断中具有重要的应用价值^[17-25]. 如在等离子体中, 电子温度和密度的测量主要由辐射光谱的强度确定, 而谱线的辐射强度主要由碰撞速率系数等参数确定. 在天体物理中, 研究者们通常通过分析电子与原子(离子)碰撞后产生的谱线强度比来确定等离子体中电子的温度和密度. 另外, 对这些过程的系统研究有助于深入理解微观粒子体系间的相互作用机制和探究各种微观物理效应^[9-25].

实验方面, 电子束离子阱(EBIT)可以在很小的体积中产生并约束高电荷态离子, 能提供近乎各种高电荷态离子的光谱, 并且有很窄的电荷态分布. EBIT 可以对电子与离子和离子与离子碰撞的

* 国家重点研发计划(批准号: 2022YFA1602500)和国家自然科学基金(批准号: 12064041, 12174315, 12274352, 12364034, 12174316, 12374384)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: phyjiang@yeah.net

‡ 通信作者. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

各种过程的截面进行绝对测量, 非常适合于研究电子与高电荷态离子的碰撞动力学过程^[26–31]. 除此之外, 实验方面还有用于研究电子与原子(离子)碰撞激发过程的交叉束或能损方法^[32–43]. 例如: 交叉束辐射方法被用于测量相对电子碰撞激发截面, 在高能情况下与玻恩近似的结果符合较好^[32]; 交叉电荷束方法是用可变能量的电子轰击靶离子, 被用于测量低离化态离子的绝对总截面, 优点是精确性好^[33,34]; 交叉束能损方法通常被用于测量不同角度的微分散射截面^[35–37]; 合并电子离子束能损方法可以探测非弹性散射出来的低能电子, 具有更高的检测灵敏度和更窄的电子能量分布^[38–43]. 近年来, 随着重离子加速器冷却储存环^[44–46]、电子能量损失谱仪^[47–49]、冷靶反冲离子动量谱仪^[50–52]、磁光阱^[53–55]、同步光子探测^[56,57]和辐射囚阱^[58,59]等实验技术的迅速发展, 已经可以对电子与离子或原子碰撞激发的绝对截面进行高精度测量.

理论方面, 目前常用的方法主要有平面波 Born 方法^[60,61]、紧耦合方法^[62–67]、R 矩阵方法^[68–70]和扭曲波方法^[71–76]等. 其中, 平面波 Born 方法是最简单的理论方法^[60,61], 主要适用于处理高能散射问题. 其假设入射电子的波函数为平面波, 忽略了靶产生的势对连续电子波函数的影响以及连续电子与束缚电子的交换效应^[60,61]. 通过这种方法, 可以计算广义振子强度, 进而得到散射截面等关键物理量. 优点是方法简单, 计算低能散射或近阈值的散射时, 激发截面会远大于真实值. 紧耦合方法是将靶原子的最外层电子和连续电子作为活动电子, 并将原子核和其他电子的静电势用模型势代替^[62,63,67]. 它通过求解耦合微分方程, 得到系统从初态到某一末态之间的跃迁概率和相应的截面^[62,63,67], 该方法适用于处理中低能散射问题. R 矩阵方法的主要思想是将空间区域分成内区和外区两个部分. 在内区中连续态与束缚态的计算类似, 主要计算 $(N+1)$ 体系的波函数. 然而, 在外区通过近似波函数来描述散射态的行为. R 矩阵方法是一种处理低能散射问题非常有效的方法. 扭曲波方法是通过构造一个尽可能反映电子与靶之间相互作用的扭曲波来近似描述散射电子的波函数, 不仅改进了平面波方法, 而且可以很好地处理连续电子与束缚电子之间的关联和交换效应. 它具有非常好的适用性、简洁性和灵活性, 对研究中低能散射问题具有很好的优势, 目前被广泛地应用于电子与原子(离子)碰撞

的研究中^[9,25,77,78].

碰撞动力学过程的研究中, 除了获得散射截面^[77]和速率系数^[78]外, 碰撞激发后辐射光子的 Stokes 参数也是实验和理论研究的热点. Stokes 参数的获取可以用来揭示碰撞过程各向异性特征以及确定碰撞激发所产生的电子云取向, 从而深入了解碰撞激发的物理机制. 理论方面: Macek 和 Jaecks^[79]给出了原子、光子与离子符合实验方法并提出了角关联参数理论, 得出了散射振幅与符合测量概率之间的关系; Barstschat 等^[80,81]描述了自旋极化电子与原子碰撞激发过程中的微分和积分 Stokes 参数测量理论; Khalid 和 Kleinpoppen^[82]给出了极化电子与极化原子碰撞的角关联参数理论; Raeker 等^[83]推导了电子云与态多极以及极化电子碰撞的散射振幅之间的关系. 实验方面: Kłosowski 等^[84,85]将磁角转换方法引用在符合实验的测量中实现了全角度测量; Hussey 等^[86,87]利用给定频率和极化的激光激发原子的同时在给定散射角上测量散射概率, 通过选择激光能量来分辨激发态的精细结构, 确定电子碰撞激发原子在完整散射几何上的微分截面.

本文基于全相对论性的多组态 Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) 理论方法^[88–93]以及大规模计算原子结构和跃迁性质的程序包 GRASP 92/2K/2018^[94–96]和 RATIP^[97,98], 介绍了我们进一步发展的相对论扭曲波方法. 详细研究了电子与原子碰撞激发过程中的电子关联效应对总截面、微分截面、态多极、微分和积分 Stokes 参数(角关联参数)、取向参数的影响, 以及等离子体屏蔽效应对碰撞激发的影响.

2 相对论扭曲波方法

2.1 连续态波函数的计算

相对论理论框架下, 连续态波函数的分波展开可写为^[99,100]

$$|\varepsilon m\rangle = c \left(\frac{1}{p\varepsilon_c} \right)^{1/2} 4\pi \sum_{\kappa} \sum_{m_l} c_m e^{i\delta_{\kappa}} i^l C \times \left(l \frac{1}{2} j; m_l, m_s, m \right) Y_l^{m_s-m} u_{\varepsilon \kappa m}, \quad (1)$$

式中, κ 为连续电子的相对论量子数, 对于 $j = l - 1/2$ 和 $j = l + 1/2$ 态, $\kappa = l$ 和 $\kappa = -(l+1)$; ε 为

电子的动能; c 为光速; p 为动量; ε_c 为电子的能量 (包括静止质量); c_m 表示归一化系数; δ_κ 为库仑相移; C 为 C-G 系数; m , m_l 和 m_s 分别为连续电子总角动量、轨道角动量和自旋磁量子数在 Z 轴的分量; $Y_l^{m_s-m}$ 为球谐函数. 单个连续电子的 Dirac 自旋轨道波函数 [101–103] 可以表示为

$$u_{\varepsilon\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{\varepsilon\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \varphi) \\ iQ_{\varepsilon\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中, $\chi_{\kappa m}(\theta, \varphi)$ 为自旋函数. $P_{\varepsilon\kappa}$ 和 $Q_{\varepsilon\kappa}$ 分别为连续电子径向波函数的大、小分量 [9], 其满足耦合的 Dirac 方程 [25,77]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) P_{\varepsilon\kappa}(r) - \left(2c - \frac{\varepsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) Q_{\varepsilon\kappa}(r) \\ = -\chi^{(P)}(r)/r, \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) Q_{\varepsilon\kappa}(r) + \left(-\frac{\varepsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) P_{\varepsilon\kappa}(r) \\ = \chi^{(Q)}(r)/r, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, $Y(r)$ 为直接势. 非齐次项 $\chi^{(P)}$, $\chi^{(Q)}$ 可以表示为

$$\chi^{(P)} = X^{(P)} + \frac{r}{c\bar{q}_a} \sum_{b \neq a} \delta_{\kappa_b \kappa_a} \varepsilon_{ab} Q_b, \quad (4)$$

$$\chi^{(Q)} = X^{(Q)} + \frac{r}{c\bar{q}_a} \sum_{b \neq a} \delta_{\kappa_b \kappa_a} \varepsilon_{ab} P_b, \quad (5)$$

其中, ε_{ab} 为拉格朗日乘子, $X^{(P)}$ 和 $X^{(Q)}$ 为交换势, 其详细的定义和求解参考文献 [104,105].

2.2 散射振幅和总截面

扭曲波理论中, 对给定入射能量和自旋分量的电子 $|\varepsilon_i m_{s_i}\rangle$ 和给定宇称总角动量以及角动量在 Z 轴分量的原子态 $|P_i J_i M_i\rangle$, 碰撞激发到末原子态 $|P_f J_f M_f\rangle$, 散射电子态为 $|\varepsilon_f m_{s_f}\rangle$ 的散射振幅 [106–108] 可写为

$$\begin{aligned} f(J_i M_i m_{s_i}, J_f M_f m_{s_f}) \\ = \frac{2a_0 \pi^{1/2}}{k_i} \sum_{l_i, j_i, m_i, l_f} \sum_{J, M} (i)^{l_i-l_f} (2l_i+1)^{1/2} \\ \times \exp[i(\delta_{\kappa_i} + \delta_{\kappa_f})] Y_{l_f}^{m_{l_f}} C\left(\frac{1}{2} 0 m_{s_i}; j_i m_i\right) \\ \times C\left(l_f \frac{1}{2} m_{l_f} m_{s_f}; j_f m_f\right) C(J_i J_i M_i m_i; JM) \\ \times C(J_f J_f M_f m_f; JM) T(\gamma_i, \gamma_f), \end{aligned} \quad (6)$$

其中, 下标 i 和 f 分别表示碰撞电子和靶离子的初

态和末态; a_0 为玻尔半径; k_i 为入射电子的相对论波数; $C(J_i J_i M_i m_i; JM)$ ($t = i, f$) 是 C-G 系数; $1/2$, l_i 和 j_i 分别表示碰撞电子的自旋量子数、轨道量子数和总角动量量子数, 而量子数 m_{s_i} , m_{l_i} 和 m_i 是它们相对于量子化 Z 轴的分量; 在束状碰撞中 $m_{l_i} = 0$, J 和 M 分别为碰撞体系 (电子+靶离子) 的总角动量及其 Z 分量量子数 [78,109]. 入射电子的相对论波数 k_i 与动量 p 或能量 ε 的关系 [78,93] 为

$$k_i^2 = \frac{p^2 a_0^2}{\hbar^2} = \varepsilon \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} \varepsilon \right], \quad (7)$$

ε 的单位为 Rydbergs, $\alpha = e^2/(\hbar c)$ 为精细结构常数. 散射矩阵元 T 可以表示为

$$\begin{aligned} T(\gamma_1, \gamma_0) \\ = \langle \gamma_f J_f, \varepsilon_f \kappa_f; J | \sum_{p, qp < q}^{N+1} \frac{1}{r_{pq}} + V_{\text{Breit}} | \gamma_i J_i, \varepsilon_i \kappa_i; J \rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

$|\gamma_i J_i, \varepsilon_i \kappa_i; J\rangle$ 和 $\langle \gamma_f J_f, \varepsilon_f \kappa_f; J |$ 分别为碰撞体系初态和末态的波函数; r_{pq} 为两个电子之间的距离; V_{Breit} 为 Breit 相互作用算符 [109–113], 当 $\omega_{qp} \rightarrow 0$ 时表示为

$$V_{\text{Breit}} = - \sum_{p > q=1}^N \frac{1}{r_{qp}} \left[\alpha_q \cdot \alpha_p + \frac{(\alpha_q \cdot r_{qp})(\alpha_p \cdot r_{qp})}{r_{qp}^2} \right], \quad (9)$$

其中, α_q 和 α_p 是 Dirac 矩阵.

微分截面可写为

$$\frac{d\sigma}{dk_f} = \frac{1}{2J_i+1} \sum_{M_i, M_j} \frac{1}{2} \sum_{m_{s_i}, m_{s_f}} |f(J_i M_i m_{s_i}, J_f M_f m_{s_f})|^2. \quad (10)$$

散射总截面表示为

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{if}}(\varepsilon) &= \iint \frac{d\sigma}{dk_f} \sin\theta d\theta d\varphi \\ &= \frac{8\pi a_0^2}{k_i^2 (2J_i+1)} \sum_J (2J+1) \times \sum_{\kappa, \kappa'} |T(\gamma_f, \gamma_i)|^2. \end{aligned} \quad (11)$$

2.3 Stokes 参数

图 1 给出了极化电子与光子符合实验示意图, Stokes 参数定义 [114] 为

$$P_1 = \frac{I^y(0^\circ) - I^y(90^\circ)}{I^y(0^\circ) + I^y(90^\circ)}, \quad (12)$$

$$P_2 = \frac{I^y(45^\circ) - I^y(135^\circ)}{I^y(45^\circ) + I^y(135^\circ)}, \quad (13)$$

$$P_3 = \frac{I^y(\text{RHC}) - I^y(\text{LHC})}{I^y(\text{RHC}) + I^y(\text{LHC})}, \quad (14)$$

其中, $I^y(\theta)$ 为所探测受激态退激偶极辐射光子偏振化方向与 Z 轴成 θ 夹角时的偏振光强, $I^y(\text{RHC})$ 和 $I^y(\text{LHC})$ 分别为右旋和左旋极化光子的强度. 根据 Bartschat 等^[80,83] 的理论可以得到 Stokes 参数与态多极的关系为

$$P_1 = \frac{1}{I^y} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_f \end{matrix} \right\} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} G_2(J_1) \langle T(J_1)_{20}^+ \rangle - G_2(J_1) \text{Re} [\langle T(J_1)_{22}^+ \rangle] \right), \quad (15)$$

$$P_2 = -\frac{2}{I^y} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_f \end{matrix} \right\} G_2(J_1) \text{Re} [\langle T(J_1)_{21}^+ \rangle], \quad (16)$$

$$P_3 = -\frac{2}{I^y} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ J_1 & J_1 & J_f \end{matrix} \right\} G_1(J_1) \text{Im} [\langle T(J_1)_{11}^+ \rangle], \quad (17)$$

式中,

$$I^y = \frac{2(-1)^{J_1+J_f}}{3\sqrt{2J_1+1}} G_0(J_1) \langle T(J_1)_{00}^+ \rangle + \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_f \end{matrix} \right\} \left(\sqrt{\frac{1}{6}} G_2(J_1) \langle T(J_1)_{20}^+ \rangle + G_2(J_1) \text{Re} [\langle T(J_1)_{22}^+ \rangle] \right); \quad (18)$$

$G_k(J)$ 为原子核自旋引起的修正系数,

$$G_k(J) = \frac{1}{2I+1} \sum_F (2F+1)^2 \left\{ \begin{matrix} J & F & I \\ F & J & K \end{matrix} \right\}, \quad (19)$$

$$F = J + I. \quad (20)$$

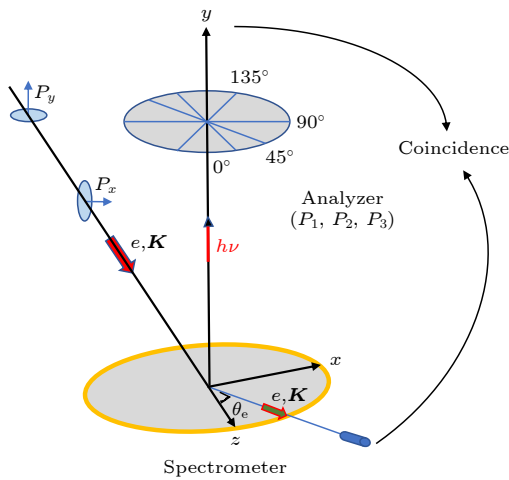


图 1 极化电子与光子 Stokes 参数测量示意图

Fig. 1. Schematic diagram of polarized electron and photon Stokes parameter measurement.

这里, I 为原子核的自旋量子数. 态多极 $\langle T(J_1)_{KQ}^+ \rangle$ 由密度矩阵理论引入, 散射后靶原子激发态 (总角动量为 J) 的密度矩阵可用态多极展开^[25]. 态多极主要由散射振幅决定, 具体计算过程参考文献^[80].

实验中如果只测量 Stokes 参数而不符合测量散射电子时, 所得到的参数称为积分 Stokes 参数. 理论上计算积分 Stokes 参数是将所有的态多极在散射角空间积分得到积分态多极, 将积分态多极代入 (15) 式—(20) 式可得到积分 Stokes 参数:

$$P_1 = \frac{1}{I^y} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_f \end{matrix} \right\} \sqrt{\frac{3}{2}} G_2(J_1) \langle T(J_1)_{20}^+ \rangle, \quad (21)$$

$$P_2 = -\frac{2}{I^y} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J_1 & J_1 & J_f \end{matrix} \right\} G_2(J_1) \text{Re} [\langle T(J_1)_{21}^+ \rangle] P_y, \quad (22)$$

$$P_3 = -\frac{2}{I^y} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ J_1 & J_1 & J_f \end{matrix} \right\} G_1(J_1) \text{Im} [\langle T(J_1)_{11}^+ \rangle] P_y. \quad (23)$$

从 (21) 式可以得出, 积分 Stokes 参数 P_1 正比于 $\langle T(J_1)_{20}^+ \rangle$, 而且与入射的极化度无关. 对于非极化电子, P_2 和 P_3 为 0; 对于极化电子, P_2 和 P_3 正比于电子的极化矢量 P_y .

3 电子关联效应对激发总截面和微分截面的影响

图 2 以中性 Xe 原子的亚稳态 $5p^56s$ $J = 2$ 能级到 $5p_{3/2}^56p_{3/2}$ ($J^P = 2+$) 能级的碰撞激发为例, 给出了电子关联效应对激发总截面的影响. 为了讨论电子关联效应的贡献, 我们使用了两种关联模型. 其中, 模型 A 为单组态近似, 包含了 $5s^25p^6$, $5s^25p^56s$ 和 $5s^25p^56p$ 组态, 共有 15 个组态波函数. 计算中 $n = 1-4$ 的轨道为原子实轨道, 价轨道包括 $5s$, $5p$, $6s$ 和 $6p$. 模型 B 中加入了 $5p^55d$ 作为参考组态, 并将 $5d_{3/2}$ 和 $5d_{5/2}$ 轨道作为价轨道. 同时, 我们利用活动空间方法, 还包含了占据轨道 $5s$ 和 $5p$ 电子单或双激发到所有关联轨道的组态. 其中, 亚稳态有 963 个组态波函数, $J^P = 2+$ 的态共有 778 个组态波函数. 图 2 给出了利用这两种相关模型计算的激发截面, 并与 Jung 等^[115] 的实验结果进行对比. 可以发现, 在低能区域, 单组态近似的结果远大于多组态模型 B 的计算结果. 随着入射

电子能量的增大, 两种模型计算结果的差别逐渐减小, 而且模型 B 的结果变化趋势与实验符合得非常好. 这表明在低能碰撞中, 电子关联效应占据主导地位, 然而在高能碰撞中, 电子碰撞激发截面受靶态波函数的影响较小. 模型 A 和 B 的计算中, 除了组态相互作用不同外, 这两种模型所选择的势也不同. 在模型 A 中, 我们选择的势是占据轨道单电子产生的平均势; 模型 B 中, 则包含了 Core-价和 Core-Core 关联势. 因此, 模型 B 计算的精度要比模型 A 的精度高. 尽管模型 B 计算结果的精度有所提高, 但是理论和实验结果明显还有一定的差距, 高阶 Born 近似的贡献还需要进一步考虑.

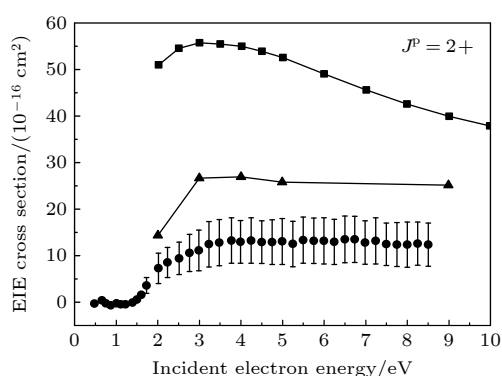


图 2 Xe 原子的激发截面随入射电子能量的变化, 方形为模型 A 的结果, 三角形为模型 B 的结果, 带误差条的圆形为 Jung 等^[115]的实验结果 (数据图片来自于文献^[116])
Fig. 2. Excitation cross section of Xe atom varies with the energy of incident electron. The square represents the results of model A, the triangle represents the results of model B, and the circle with error bars represents the experiment results of Jung et al^[115]. From Ref. ^[116].

图 3 给出了电子关联效应对入射电子能量为 8 eV 时, Hg 原子从基态激发到 6s6p 3P_1 的碰撞激发微分截面的影响, 并与 Goeke 等^[117]利用符合测量技术的实验结果比较. 对于高 Z 中性原子, 由于其具有较强的关联效应, 大规模电子组态的扩展非常必要^[77]. 为了详细讨论电子关联效应对激发截面的影响, 采用 3 种计算模型来描述靶态波函数. 模型 I 是单组态近似, 原子实轨道包含主量子数 $n = 1-5$ 的轨道, 价轨道包括 6s, 6p_{1/2} 和 6p_{3/2}. 这些单电子轨道波函数用扩展能级 (EOL) 方法^[77,93]优化, 电子组态只包含了 6s² 和 6s6p $J = 1$, 共有 3 个能级; 模型 II 中, 将基态和激发态分成 2 组分别优化, 而且单电子轨道中进一步加入 6d 和 6f 作为关联轨道, 并包含一个或两个虚电子激发到关联轨道的电子组态; 模型 III 中, 进一步加入 $n = 7$

的单电子轨道作为关联轨道, 也包含一个或两个虚电子激发到 7l 关联轨道的电子组态.

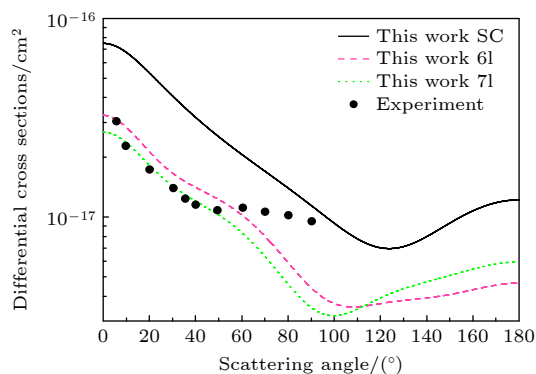


图 3 入射电子能量为 8 eV 时, 不同计算模型下 Hg 原子 $^1S_0 - ^3P_1$ 电子碰撞激发微分截面, 其中 SC 为模型 I 单组态近似的计算结果, 6l 为模型 II 的计算结果, 7l 为模型 III 的计算结果, Experiment 为 Goeke 等^[117]的实验结果

Fig. 3. Differential cross sections of electron collision excitation of Hg atom $^1S_0 - ^3P_1$ under different calculation models, when the incident electron energy is 8 eV. The SC represents the calculation results of single configuration approximation of model I, 6l represents the calculation results of model II, 7l represents the calculation results of model III, Experiment represents the results of Goeke et al^[117].

由图 3 可以看出, 在整个散射角范围内激发截面减小了一个量级. 对于低能散射, 随着散射角的增大, 激发截面减小得比较缓慢. 单组态计算的结果在散射角为 120° 时出现了极小点, 模型 II 和模型 III 的计算结果在 100° 时出现了极小点. 这是因为散射振幅计算公式中的球谐函数 $Y_{l_f}^{m_{l_f}}$ 是散射角 θ 的函数, 不同分波通道求和之后会在一定的角度出现极小值, 此现象在物理上可以理解为不同分波通道干涉最小值的点. 另外, 对不同模型的计算结果与实验结果相比较可以发现: 利用模型 I 的计算结果与实验结果相差非常大, 利用模型 II 的计算结果已经接近于实验结果. 当散射角小于 50° 时, 利用模型 III 的计算结果与实验结果符合得非常好. 但是当散射角大于 50° 时, 目前的理论和实验还有比较大的差别.

4 共振激发对总截面的影响

共振激发可以看成两步过程, 即俘获和自电离, 共振截面^[108]可写为

$$\begin{aligned} & \sigma_{\varepsilon_i}^{\text{res}} (\beta_i J_i M_i - \beta_f J_f M_f) \\ &= \sum_k \sigma_{\varepsilon_i}^{\text{cap}} (\beta_i J_i M_i - \beta_k J_k M_k) \\ & \quad \times B (\beta_k J_k M_k - \beta_f J_f M_f), \end{aligned} \quad (24)$$

式中, σ^{cap} 为俘获截面. 自电离过程的分值比 B 为

$$\begin{aligned} & B (\beta_k J_k M_k - \beta_f J_f M_f) \\ &= \frac{A^a (\beta_k J_k M_k - \beta_f J_f M_f)}{\sum_m A^a (k-m) + \sum_{m'} A^r (k-m')}, \end{aligned} \quad (25)$$

其中, $A^a(k-m)$ 和 $A^r(k-m')$ 是能级之间的自电离和辐射概率.

Ba^{46+} 离子 M2 线的共振过程可以表示为

$$\begin{aligned} & \text{e}^- (\varepsilon_i l_i j_i) + \text{Ba}^{46+} (2p^6; J_i = 0, M_i = 0) \rightarrow \\ & \text{Ba}^{45+} (2p^5 n l n' l'; J_k M_k) \rightarrow \\ & \text{Ba}^{46+} (2p^5 3s; J_f = 2, M_f) + \text{e}^- (\varepsilon_f l_f j_f). \end{aligned} \quad (26)$$

图 4 以类氢 Ba^{46+} 离子从基态 $2p^6 J=0$ 到 $2p^5 3s J=2$ 的磁能级之间的激发截面为例, 讨论了共振激发对总截面的影响. 初态和末态波函数的计算中, 不仅包含了 $2s^2 2p^6$ 和 $2s^2 2p^5 3s$ 参考组态, 而且包含了 $2s^2 2p^5 3p$, $2s^2 2p^5 3d$, $2s 2p^5 3s$, $2s 2p^5 3p$ 和 $2s 2p^5 3d$ 参考组态, 其中共包括 37 个能级. 对于低能量且高量子数的连续轨道波函数, 连续轨道不能很快达到正弦渐近行为, 并且在散射矩阵元的计算中, 大半径处连续轨道的贡献也非常大. 因此有必要计算非常大 r 的连续态波函数, 在该工作中选取最大的 $r = 190a_0$.

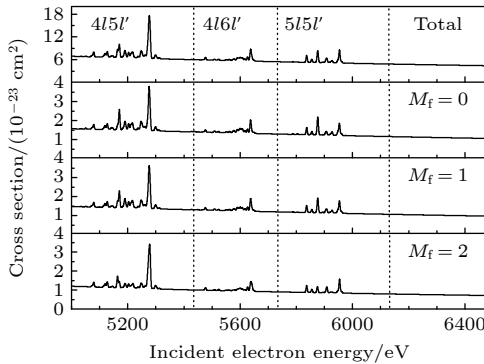


图 4 从基态 $2p^6 J=0$ 到 $2p^5 3s J=2$ 的磁能级之间的激发截面 (数据图片来自于文献 [108])

Fig. 4. Excitation cross sections from ground state $2p^6 J=0$ to $2p^5 3s J=2$ magnetic energy levels. From Ref. [108].

图 4 的计算包括了从基态到 $4l5l'$, $4l6l'$ 和 $5l5l'$ 共振激发的贡献, 可以看出共振结构在该能

量范围内非常明显. 当入射电子能量在 5—5.2 keV 之间时, $4l5l'$ 双激发共振占主导, 其中共振贡献的激发截面提高超过直接激发截面的 2 倍. EBIT 装置实验 [118] 中发现, 由于共振激发, 在该能量范围内 M2 辐射线强度增强了 50%. 文献 [119] 中, $4l6l'$ 和 $5l5l'$ 的贡献被认为非常小而无法在实验中观察. 但是在极化的实验测量中, 这两个共振过程是比较明显的. 从目前的工作可以看到, $5l5l'$ 和 $4l6l'$ 的贡献相对较小, $4l6l'$ 比 $5l5l'$ 共振过程的贡献更小.

5 碰撞激发后辐射光子的 Stokes 参数和态多极

图 5 给出了入射电子能量为 45 eV 时, 包括不同分波情况下的电子与 Ca 原子从基态到 $4s4p {}^1P_1$ 的微分 Stokes 参数, 并与 Dyl 等 [120] 利用电子与光子符合实验方法的测量结果比较. Ca 原子 $4s^2 {}^1S_0$ — $4s4p {}^1P_1$ 的激发能为 2.93 eV, 当入射电子能量大于 40 eV 时, 属于中能碰撞过程, 从理论的角度而言, 激发截面可以很快达到收敛. 计算 Ca 原子靶态波函数只包含了单组态的计算, 即参考组态只包含了 $4s^2$ 和 $4s4p J=1$. 比较包含不同分波的计算

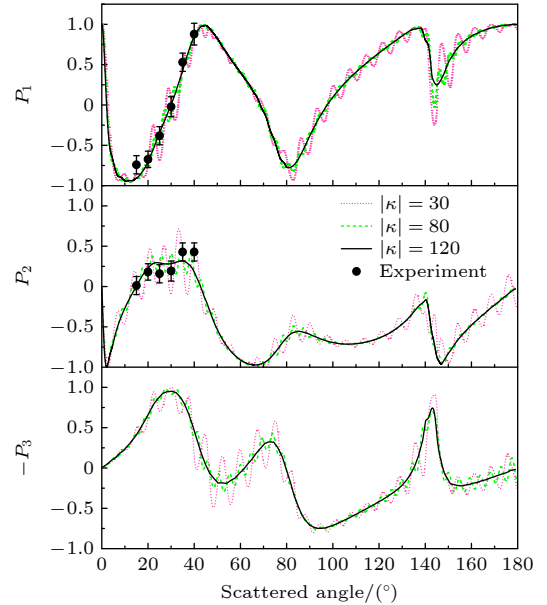


图 5 入射电子能量为 45 eV 时, 电子与 Ca 原子从基态到 1P_1 的碰撞激发微分 Stokes 参数 P_1 , P_2 和 $-P_3$, 其中 κ 为最大分波量子数, Experiment 为 Dyl 等 [120] 的实验结果

Fig. 5. Collision excitation differential Stokes parameters P_1 , P_2 and $-P_3$ of electron and Ca atom from ground state to 1P_1 , when the incident electron energy is 45 eV. κ is the maximum partial wave quantum number, and Experiment represents the results of Dyl et al [120].

结果可以发现, 包含最大分波为 30 和 80 时, Stokes 参数振荡非常大, 尤其是对于 P_3 . 只有分波达到 120 时, Stokes 参数的变化才趋于光滑. 与实验相比较可以看出, 目前我们的计算结果与 Dy1 等^[120]的实验结果符合得非常好.

图 6 为入射电子能量为 8 eV 时, Hg 原子从基态激发到 3P_1 的归一化的态多极, 并与 Sohn 等^[122]的实验结果进行比较. 可以看出, 由于入射电子能量比较低, 电子关联效应的影响非常显著. 比较不同模型的计算结果可以发现, 散射角小于 30° 时, 单组态和多组态计算的结果差异较小且与实验结果吻合较好. 图 6(d) 中的电子关联效应使得 $\langle T(J)_{11}^+ \rangle_{un}$ 的值减小, 当散射角大于 50° 时, 态多极逐渐接近于 0, 而且随着散射角的增大, 实验结果逐渐靠近于多组态的计算结果. 对于 $\langle T(J)_{20}^+ \rangle_{un}$, $\langle T(J)_{21}^+ \rangle_{un}$

和 $\langle T(J)_{22}^+ \rangle_{un}$ (图 6(a)—(c)), 在实验测量的角度范围内, 理论计算和实验测量结果的变化趋势符合得比较好, 但是理论与实验之间还有一定的差别. 对比极化电子散射的态多极 (图 6(e)—(i)) 可以发现, 对于 $\langle T(J)_{00}^+ \rangle_{py}$ 和 $\langle T(J)_{20}^+ \rangle_{py}$ 单组态的计算结果与实验似乎符合得非常好, 但是对于其他 (如 $\langle T(J)_{21}^+ \rangle_{py}$ 和 $\langle T(J)_{22}^+ \rangle_{py}$) 多组态的计算结果与实验符合得比较好. 对于低能散射, 电子关联效应非常强, 实验上测量微分态多极参数也非常困难. 目前我们只能找到一组实验结果, 实验上也并未给出相应的误差分析, 我们建议高精度的实验是必要的.

态多极的计算结果依赖于入射电子的能量^[119], 图 6 中单组态和多组态的计算结果差异较大. 图 7 则给出了入射电子能量为 15 eV 时, Hg 原子从基

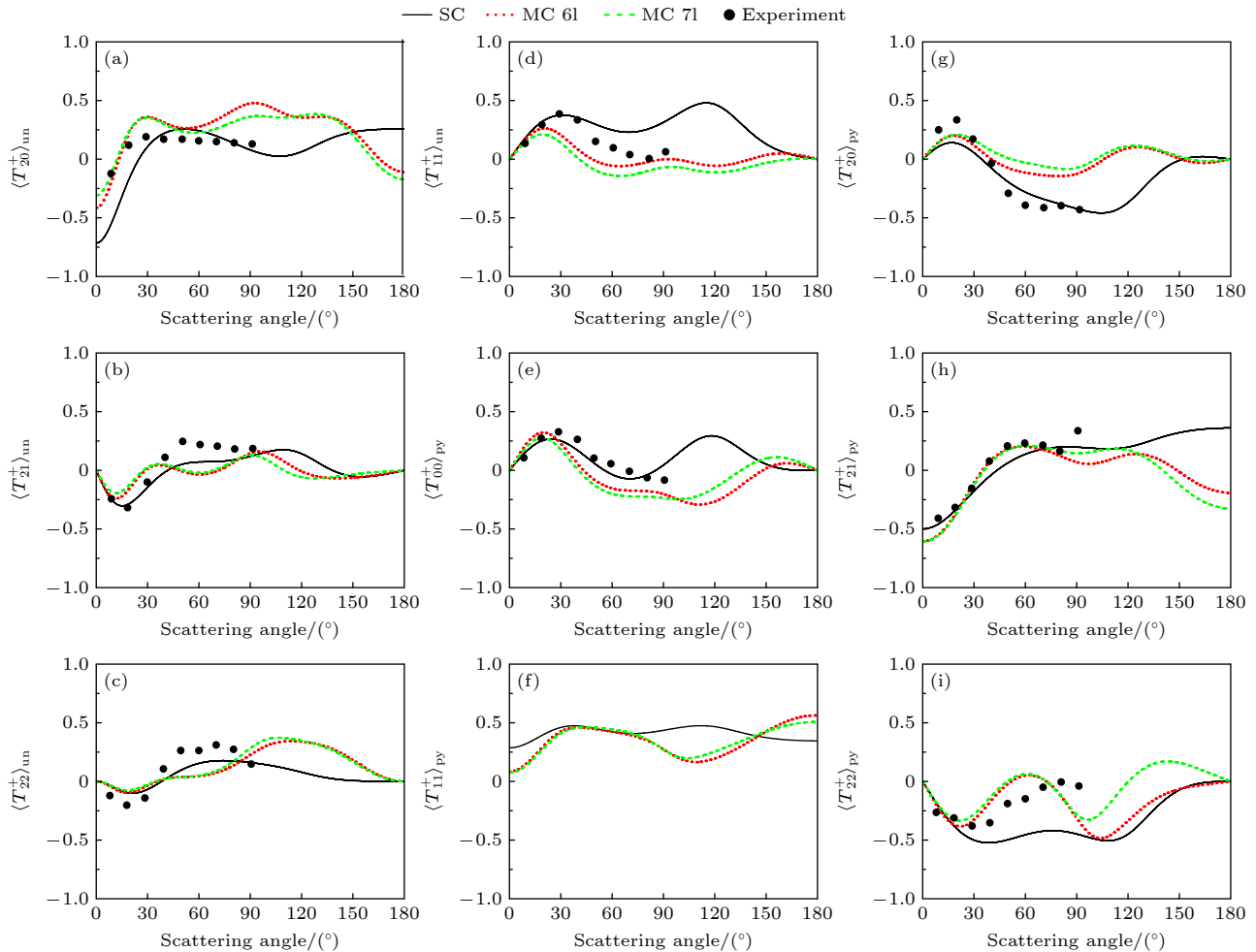


图 6 入射电子能量为 8 eV 时, 不同关联模型下计算的 Hg 原子 1S_0 - 3P_1 归一化的态多极, 其中 SC 为利用单组态计算的结果, MC 6l 为考虑了 6l 关联轨道的计算结果, MC 7l 为考虑了 7l 关联轨道的计算结果, Experiment 为 Sohn 等^[122]的实验结果

Fig. 6. Normalized state multipoles of Hg atom 1S_0 - 3P_1 calculated under different correlation models, when the incident electron energy is 8 eV. The SC represents the calculation results using a single configuration, MC 6l represents the calculation results considering the 6l correlation orbit, MC 7l represents the calculation results considering the 7l correlation orbit, and Experiment refers to the results of Sohn et al^[122].

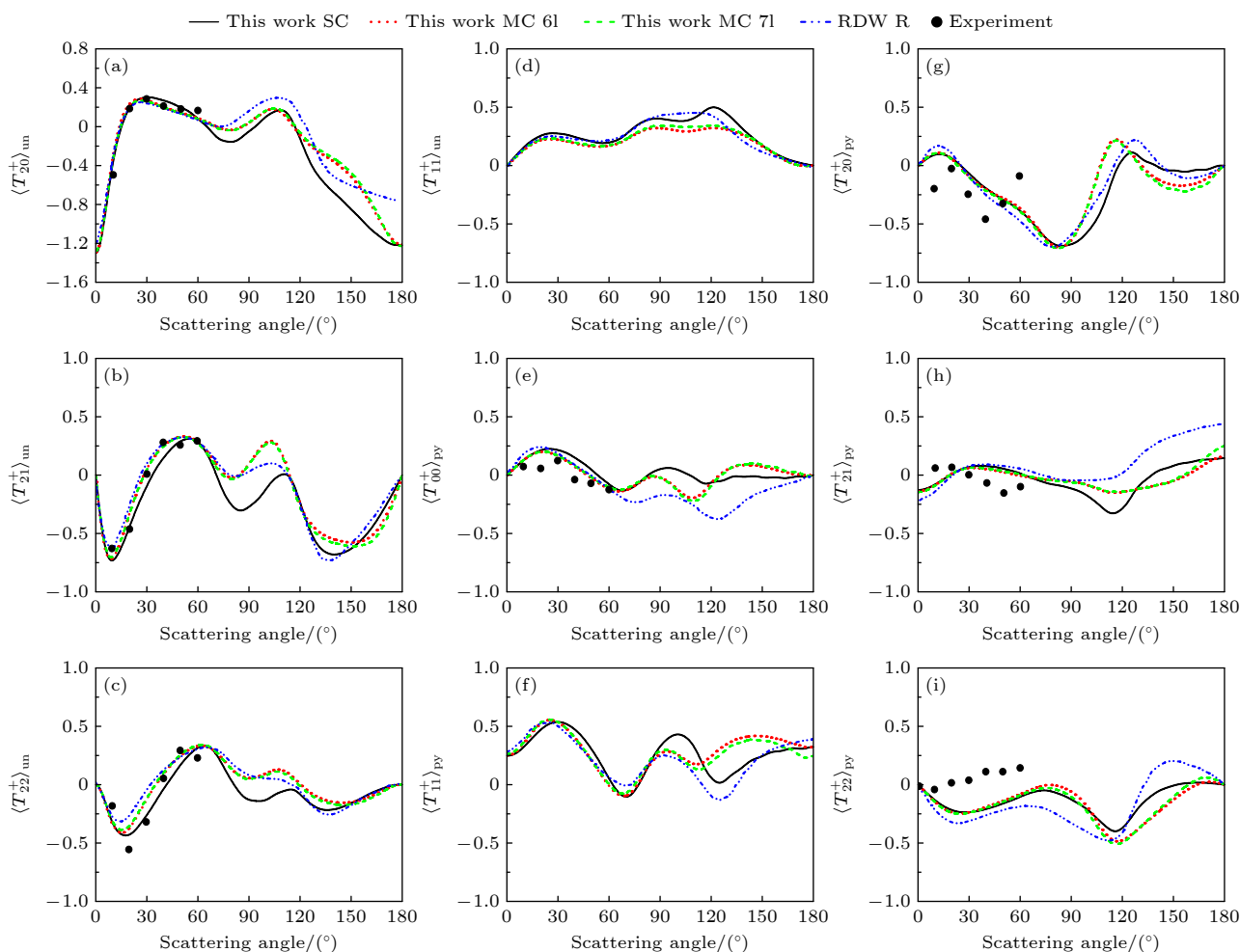


图7 入射电子能量为15 eV时,不同关联模型下计算的Hg原子 $1S_0-3P_1$ 归一化的态多极,其中SC为利用单组态计算的结果,MC 6l为考虑了6l关联轨道的计算结果,MC 7l为考虑了7l关联轨道的计算结果,RDW R为Srivastava等^[121]的理论结果,Experiment为Sohn等^[122]的实验结果

Fig. 7. Normalized state multipoles of Hg atom $1S_0-3P_1$ calculated under different correlation models, when the incident electron energy is 15 eV. The SC represents the calculation results using a single configuration, MC 6l represents the calculation results considering the 6l correlation orbit, MC 7l represents the calculation results considering the 7l correlation orbit, RDW R represents the theoretical results of Srivastava et al^[121], and Experiment refers to the results of Sohn et al^[122].

态激发到 $3P_1$ 的归一化的态多极,并与Srivastava等^[121]的理论结果和Sohn等^[122]的实验结果作比较.图7(e)—(i)给出了横向极化电子碰撞激发的态多极,通过比较不同模型的计算结果可以发现,电子关联效应对态多极的影响与非极化电子碰撞对态多极的影响非常类似.当散射角较小时,电子关联效应的影响比较小.随着散射角的增大,电子关联效应逐渐显现,但是其影响比电子关联效应对激发微分截面的影响小.理论与实验结果相比可以发现,部分结果符合较好,而另一部分结果存在符合较差的情况.例如,图7(e)为值比较小的 $\langle T(J)_{00}^+ \rangle_{py}$,并且理论与实验符合得相对较好.但是,对于 $K=2$ 的态多极(图7(g)—(i)),理论计算结果与实验测量值的差别非常大,不仅理论值与实

验值的变化趋势不一样,而且理论值与实验值之间的符号都互不相同.通过对实验结果以及不同模型的计算结果比较,可以得到:电子关联效应对小角散射的影响比较小,随着散射角增大,电子关联效应的影响逐渐变大,但是相比电子关联效应对激发截面的影响较小.对于非极化电子散射的态多极,实验与理论结果符合得非常好,对于极化电子散射的态多极,理论与实验结果还有很大的差别,还需要理论与实验做进一步的研究.

6 等离子体屏蔽效应对碰撞激发的影响

等离子体中,热力学效应和库仑效应同时存

在, 通常利用库仑参数 Γ 来判断哪种效应占主要地位^[123,124]. 目前, 理论上常用两种模型来描述等离子体静电屏蔽势, 即 Debye-Hückel 模型和离子球 (IS) 模型^[125]. Debye-Hückel 模型由线性化的 Poisson-Boltzmann 方程得到, 主要应用于低密高温 ($\Gamma \ll 1$, 弱耦合等离子体) 等离子体^[123,124]. 我们知道等离子体屏蔽效应对原子动力学过程的影响非常大, 但是到目前为止, 理论方面没有关于等离子体屏蔽效应对谱线极化效应的研究.

在 Debye 屏蔽势模型中, N 电子原子体系的哈密顿量^[126] 可以写为

$$H^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^N \left[c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 - \frac{Z}{r_i} e^{-r_i/\lambda} \right] + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}}^N \frac{1}{r_{ij}} e^{-r_{ij}/\lambda}, \quad (27)$$

式中, λ 为 Debye 长度, 它与等离子体平均电子密度 n_e 及电子温度 T_e 之间的关系为

$$\lambda = \left[\frac{kT_e}{4\pi n_e} \right]^{1/2}, \quad (28)$$

其中, k 为 Boltzmann 常数. 根据 (28) 式, λ 与电子温度 $T_e^{1/2}$ 成正比, 与 $n_e^{1/2}$ 成反比. 对于给定的 λ , λ 越小说明等离子体屏蔽越强, λ 越大说明屏蔽越弱. 本节中所涉及的是高离化态离子, 因此在计算等离子体屏蔽效应时, 采用了与 Pindzola 等^[127] 相似的办法. 即等离子体的密度可以影响连续电子波函数以及连续电子与束缚电子之间的相互作用, 但不足以影响靶态中的束缚电子. 为了处理相对简

单, 进一步采用了 Whitten 等^[124] 的经典文章以及 Pindzola 等^[127] 的屏蔽模型. 在这种情况下, 库仑径向矩阵元 (所谓 Slater 积分) 可以写为

$$D^k(ab, cd) = \int_0^\infty \int_0^\infty [P_a P_c + Q_a Q_c] \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \times e^{-\lambda/r} [P_b P_d + Q_b Q_d] dr_1 dr_2, \quad (29)$$

其中, P_i 和 Q_i ($i = a, b, c, d$) 代表单电子轨道波函数. 连续态波函数方程可写为

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) P_{\epsilon k}(r) - \left(2c - \frac{\epsilon}{c} + \frac{Y(r)e^{-\lambda/r}}{cr} \right) Q_{\epsilon k}(r) \\ = -\chi^{(P)}(r)/r, \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) Q_{\epsilon k}(r) + \left(-\frac{\epsilon}{c} + \frac{Y(r)e^{-\lambda/r}}{cr} \right) P_{\epsilon k}(r) \\ = \chi^{(Q)}(r)/r. \end{aligned} \quad (30)$$

为了更进一步说明等离子体屏蔽效应对激发截面的影响, 图 8 给出了入射电子能量为 1.5 倍的激发能时, 电子碰撞激发截面随 Debye 长度的变化. 从图 8 可以看出, 当 Debye 长度大于 $10a_0$ 时, 所有的激发截面变化比较平缓, 说明等离子体屏蔽效应的影响不大. 但是当 Debye 长度小于 $10a_0$ 时, 随着屏蔽效应的增大, 激发截面迅速减小. 而且, 对于到 $1P_1$ 以及相应的 $M = 0$ 和 $M = 1$ 磁量子能级, 激发的变化趋势相似, 3 条曲线平行地变化. 但是对于到 $3P_1$ 的激发, 到 $M = 0$ 的激发截面比 $M = 1$ 的激发截面减小得更快, 而且两条曲线出现了交叉.

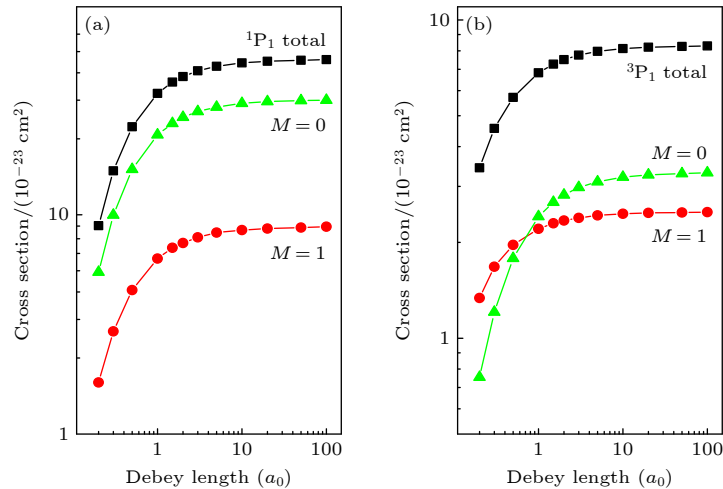


图 8 从基态 $1s^2 1S_0$ 到 $1s2p 1P_1$ 和 $3P_1$ 的激发截面随屏蔽长度的变化 (数据图片来自于文献^[128])

Fig. 8. Excitation cross sections from ground state $1s^2 1S_0$ to $1s2p 1P_1$ and $3P_1$ vary with shielding length. From Ref. ^[128].

7 总 结

本文基于全相对论多组态 Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) 理论方法以及相应的程序包 GRASP 92/2K/2018 和 RATIP, 发展并建立了一套全相对论理论框架下研究电子碰撞激发过程的扭曲波方法和程序. 该理论方法和程序系统有以下几个优点:

1) 对连续电子波函数的求解中, 不仅考虑了靶原子产生的势场对连续态波函数的影响, 而且包含了束缚电子与连续电子的交换相互作用, 并采用连续电子与离子波函数的乘积构成的反对称化耦合波函数作为体系的波函数. 因此, 该方法可以很好地研究低能和中高能电子散射过程.

2) 该方法中, 靶态波函数基于 MCDHF 理论方法得到. MCDHF 的优势是能够很好地考虑电子关联效应、Breit 相互作用和 QED 效应对靶态波函数的影响. 在碰撞激发矩阵元的计算中, 也包含了 Breit 相互作用的贡献. 因此, 该方法结合了 MCDHF 方法和扭曲波方法的优势, 可以研究高阶效应对碰撞动力学过程的影响, 得到高精度的理论数据.

3) 该程序不仅可以研究电子与原子碰撞激发过程的散射截面和等离子体屏蔽效应对碰撞激发的影响, 而且可以很好地研究电子与复杂原子碰撞激发的态多极、微分/积分 Stokes 参数 (角关联参数) 和取向参数等, 为详细研究电子碰撞激发过程提供了很好的工具.

参考文献

- [1] Fontes C J, Sampson D H, Zhang H L 1993 *Phys. Rev. A* **47** 1009
- [2] Fontes C J, Zhang H L, Sampson D H 1999 *Phys. Rev. A* **59** 295
- [3] Ren C, Wu Z W, Jiang J, Xie L Y, Zhang D H, Dong C Z 2018 *Phys. Rev. A* **98** 012711
- [4] Jakubowicz H, Moores D L 1981 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **14** 3733
- [5] Bartschat K, Burke P G 1987 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **20** 3191
- [6] Teng H G 2000 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **33** L553
- [7] Wu D, Loch S D, Pindzola M S, Balance C P 2012 *Phys. Rev. A* **85** 012711
- [8] Liu P F, Liu Y P, Zeng J L, Yuan J M 2014 *Phys. Rev. A* **89** 042704
- [9] Jiang J 2007 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [蒋军 2007 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [10] Suckewer S, Hinnov E 1978 *Phys. Rev. Lett.* **41** 756
- [11] Eichler J 1990 *Phys. Rep.* **193** 165
- [12] Vane C R, Datz S, Dittner P F, Giese J, Jones N L, Krause H F, Rosseel T M, Peterson R S 1994 *Phys. Rev. A* **49** 1847
- [13] Wan J J, Dong C Z, Ding X B, Ma X W, Rzadkiewicz J, Stöhlker T, Fritzsche S 2009 *Phys. Rev. A* **79** 022707
- [14] Eichler J, Stöhlker T 2007 *Phys. Rep.* **439** 1
- [15] Biswas S, Monti J M, Tachino C A, Rivarola R D, Tribedi L C 2015 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48** 115206
- [16] Abdurakhmanov I B, Kadyrov A S, Avazbaev S K, Bray I 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 115203
- [17] Zhang S B, Wang J G, Janev R K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 023203
- [18] Fang X, Liu X W 2013 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **429** 2791
- [19] Menchero L F, Zatsarinny O, Bartschat K 2017 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **50** 065203
- [20] Cheung C, Safronova M, Porsev S 2021 *Symmetry* **13** 621
- [21] Wu Z W, He Z M, Tian Z Q, Dong C Z, Fritzsche S 2022 *Phys. Rev. A* **105** 062813
- [22] Li F H, Li J T, Zheng Y, Guo L X, Liu W, Liu Z Y 2023 *IEEE T. Plasma Sci.* **51** 3579
- [23] Yan J, Liu Y P, Hou Y, Gao C, Wu J H, Zeng J L, Yuan J M 2023 *Chin. Phys. B* **32** 063101
- [24] Zeng J L, Jiang X B, Gao C, Wu J H, Yuan J M 2024 *Results Phys.* **58** 107522
- [25] Liu L J 2012 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [刘丽娟 2012 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [26] Silver J D, Varney A J, Margolis H S, et al. 1994 *Rev. Sci. Instrum.* **65** 1072
- [27] Biedermann C, Förster A, Fußmann G, Radtke R 1997 *Phys. Scr.* **T73** 360
- [28] Crespo López-Urrutia J R, Dorn A, Moshhammer R, Ullrich J 1999 *Phys. Scr.* **T80B** 502
- [29] Beiersdorfer P, Brown G V 2015 *Phys. Rev. A* **91** 032514
- [30] Hu Z M, Han X Y, Li Y M, Kato D, Tong X M, Nakamura N 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 073002
- [31] Yan C L, Lu Q, Xie Y M, Li B L, Fu N, Zou Y, Chen C, Xiao J 2022 *Phys. Rev. A* **105** 032820
- [32] Dunn G H, Djurić N, Chung Y S, Bannister M, Smith A C H 1995 *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **98** 107
- [33] Taylor P O, Dunn G H 1973 *Phys. Rev. A* **8** 2304
- [34] Rogers W T, Olsen J Q, Dunn G H 1978 *Phys. Rev. A* **18** 1353
- [35] Huber B A, Ristori C, Hervieux P A, Maurel M, Guet C, Andrä H J 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 1407
- [36] Huber B A, Ristori C, Guet C, Kitchler D, Johnson W R 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2301
- [37] Srigengan B, Williams I D, Newell W R 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** L605
- [38] Bannister M E, Djurić N, Woitke O, Dunn G H, Chung Y S, Smith A C H, Wallbank B, Berrington K A 1999 *Int. J. Mass Spectrom.* **192** 39
- [39] Phaneuf R A, Havener C C, Dunn G H, Müller A 1999 *Rep. Prog. Phys.* **62** 1143
- [40] Wallbank B, Bannister M E, Krause H F, Chung Y S, Smith A C H, Djurić N, Dunn G H 2007 *Phys. Rev. A* **75** 052703
- [41] Smirnov Yu M 2015 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48** 165204
- [42] Smirnov Yu M 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 175204
- [43] Smirnov Yu M 2017 *Russ. J. Phys. Chem. B* **11** 873
- [44] Huang Z K, Wen W Q, Wang S X, et al. 2020 *Phys. Rev. A*

- 102 062823
- [45] Wang S X, Huang Z K, Wen W Q, et al. 2022 *Phys. Rev. A* **106** 042808
- [46] Shao L, Huang Z K, Wen W Q, Wang S X, Huang H K, Ma W L, Liu C, Wang H B, Chen D Y, Liu X, Zhou X P, Zhao D M, Zhang S F, Zhu L F, Ma X W 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 123402 (in Chinese) [邵林, 黄忠魁, 汶伟强, 汪书兴, 黄厚科, 马万路, 刘畅, 汪寒冰, 陈冬阳, 刘鑫, 周晓鹏, 赵冬梅, 张少锋, 朱林繁, 马新文 2024 物理学报 **73** 123402]
- [47] Liu X J, Zhu L F, Yuan Z S, Li W B, Cheng H D, Huang Y P, Zhong Z P, Xu K Z, Li J M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 193203
- [48] Du X J, Xu Y C, Wang L H, Li T J, Ma Z R, Wang S X, Zhu L F 2022 *Phys. Rev. A* **105** 012812
- [49] Wang D H, Wang S X, Nie Z W, Wang L H, Xu Y C, Du X J, Zhu L F 2022 *Plasma Sources Sci. Technol.* **31** 045012
- [50] Dörner R, Mergel V, Jagutzki O, Spielberger L, Ullrich J, Moshhammer R, Schmidt-Böcking H 2000 *Phys. Rep.* **330** 95
- [51] Xia Z H, Ren B, Zhang R T, Wei L, Han J, Meng T, Wang J, Ma P, Zhang Y, Tu B, Xiao J, Yao K, Zou Y, Zhu X L, Guo D L, Ma X, Wei B 2022 *Astrophysical J.* **933** 207
- [52] Ren B, Ma P, Zhang Y, Wei L, Han J, Xia Z, Wang J, Meng T, Yu W, Zou Y, Yang C L, Wei B 2022 *Phys. Rev. A* **106** 012805
- [53] Uhlmann L J, Dall R G, Truscott A G, Hoogerland M D, Baldwin K G H, Buckman S J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 173201
- [54] Łukowski M, MacAskill J A, Secombe D P, McGrath C, Sutton S, Teeuwen J, Kedzierski W, Reddish T J, McConkey J W, van Wijngaarden W A 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 3535
- [55] Byron L J, Dall R G, Truscott A G 2010 *Phys. Rev. A* **81** 013405
- [56] Daw A, Gardner L D, Janzen P H, Kohl J L 2006 *Phys. Rev. A* **73** 032709
- [57] Knehr E, Kuzmin A, Doerner S, Wuensch S, Ilin K, Schmidt H, Siegel M 2020 *Appl. Phys. Lett.* **117** 132602
- [58] Heddle D W O, Samuel M J 1970 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **3** 1593
- [59] Stewart Jr M D, Chilton J E, Boffard J B, Lin C C 2002 *Phys. Rev. A* **65** 032704
- [60] McCarthy I E, Weigold E 1988 *Rep. Prog. Phys.* **51** 299
- [61] McCarthy I E, Weigold E 1991 *Rep. Prog. Phys.* **54** 789
- [62] Fursa D V, Bray I 1995 *Phys. Rev. A* **52** 1279
- [63] Bray I, Fursa D V 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2674
- [64] Bartschat K, Zatsarinny O 2015 *Phys. Scr.* **90** 054006
- [65] Zhao G P, Liu L, Chang Z, Wang J G, Janev R K 2018 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 085201
- [66] Liu Y D, Jia C C, Ma M X, Gao X, Liu L, Wu Y, Chen X J, Wang J G 2024 *Chin. Phys. B* **33** 083401
- [67] Yang W, Cai X H, Yu D Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2128 (in Chinese) [杨威, 蔡晓红, 于得洋 2005 物理学报 **54** 2128]
- [68] Whiteford A D, Badnell N R, Ballance C P, O'Mullane M G, Summers H P, Thomas A L 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 3179
- [69] Fan Q P, Wang W H, Hu F, Cao L F, Zhang Q Q, Liu Y W, Jiang G 2014 *Chin. Phys. B* **23** 113401
- [70] Chen Y Q, Jiang X W, Yao L F, Jiang W, Liu H N, Zhang Y 2023 *Plasma Sources Sci. Technol.* **32** 045017
- [71] Bar-Shalom A, Klapisch M, Oreg J 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1773
- [72] Meng F C, Chen C Y, Wang Y S, Zou Y M 2007 *Chinese Phys. Lett.* **24** 3404
- [73] Gu M F 2008 *Can. J. Phys.* **86** 675
- [74] Podpaly Y, Clementson J, Beiersdorfer P, Williamson J, Brown G V, Gu M F 2009 *Phys. Rev. A* **80** 052504
- [75] Ma Y L, Liu L, Xie L Y, Wu Y, Zhang D H, Dong C Z, Qu Y Z, Wang J G 2022 *Chin. Phys. B* **31** 043401
- [76] Zhang C Y, Wu S J, Wang K, Si R, Yao K, Huang Z K, Wen W Q, Ma X W, Chen C Y, Badnell N R 2023 *Phys. Rev. A* **108** 022801
- [77] Du G F 2011 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [杜贵锋 2011 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [78] Yang N X 2009 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [杨宁选 2009 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [79] Macek J, Jaecks D H 1971 *Phys. Rev. A* **4** 2288
- [80] Bartschat K, Blum K, Hanne G F, Kessler J 1981 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **14** 3761
- [81] Bartschat K, Scott N S, Blum K, Burke P G 1984 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **17** 269
- [82] Khalid S M, Kleinpoppen H 1984 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **17** 243
- [83] Raeker A, Blum K, Bartschat K 1993 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **26** 1491
- [84] Kłosowski L, Piwiski M, Dziczek D, Wiśniewska K, Chwiroł S 2007 *Meas. Sci. Technol.* **18** 3801
- [85] Kłosowski L, Piwiski M, Dziczek D, Pleskacz K, Chwiroł S 2009 *Phys. Rev. A* **80** 062709
- [86] Hussey M, Murray A, MacGillivray W, King G C 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 133202
- [87] Percival A K, Jhumka S, Hussey M, Murray A J 2011 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44** 105203
- [88] Polasik M 1989 *Phys. Rev. A* **39** 616
- [89] Wu Z W, Tian Z Q, Dong C Z, Surzhykov A, Fritzsche S 2023 *New J. Phys.* **25** 093039
- [90] Ding X B, Koike F, Murakami I, Kato D, Sakaue H A, Dong C Z, Nakamura N 2012 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 035003
- [91] Wang K, Li S, Jönsson P, Fu N, Dang W, Guo X L, Chen C Y, Yan J, Chen Z B, Si R 2017 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **187** 375
- [92] Xie L Y 2008 *Ph. D. Dissertation* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [颜录有 2008 博士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [93] Wu Z W 2012 *M. S. Thesis* 2012 (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [武中文 2012 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [94] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P 1996 *Compt. Phys. Commun.* **94** 249
- [95] Jönsson P, Gaigalas G, Bieroń J, Fischer C F, Grant I P 2013 *Compt. Phys. Commun.* **184** 2197
- [96] Fischer C F, Gaigalas G, Jönsson P, Bieroń J 2019 *Compt. Phys. Commun.* **237** 184
- [97] Fritzsche S, Fischer C F, Dong C Z 2000 *Compt. Phys. Commun.* **124** 340
- [98] Fritzsche S 2012 *Compt. Phys. Commun.* **183** 1525
- [99] Carse G D, Walker D W 1973 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **6** 2529
- [100] Walker D W 1974 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **7** 97
- [101] Dong C Z, Xie L Y, Zhou X X, Ma X W, Fritzsche S 2003 *Hyperfine Interact.* **146** 161
- [102] Li J G, Dong C Z, Yu Y J, Ding X B, Fritzsche S, Fricke B 2007 *Sci. China Phys. Mech.* **50** 707
- [103] Xie L Y, Wang J G, Janev R K, Qu Y Z, Dong C Z 2012

- Eur. Phys. J. D* **66** 125
- [104] Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H, Mayers D F, Pyper N C 1980 *Compt. Phys. Commun.* **21** 207
- [105] Dylla K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Compt. Phys. Commun.* **55** 425
- [106] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G, Yan J, Fritzsche S 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 691
- [107] Li B W, Dong C Z, Jiang J, Wang J G 2010 *Eur. Phys. J. D* **59** 201
- [108] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G 2008 *Phys. Rev. A* **78** 022709
- [109] Ma X Y 2013 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [马小云 2013 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [110] Grant I P 1970 *Adv. Phys.* **19** 747
- [111] Rodrigues G C, Ourdane M A, Bieroń J, Indelicato P, Lindroth E. 2000 *Phys. Rev. A* **63** 012510
- [112] Dong C Z, Fritzsche S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 012507
- [113] Fischer C F, Godefroid M, Brage T, Jönsson P, Gaigalas G 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 182004
- [114] Andersen N, Broad J T, Campbell E E B, Gallagher J W, Hertel I V 1997 *Phys. Rep.* **278** 107
- [115] Jung R O, Boffard J B, Anderson L W, Lin C C 2005 *Phys. Rev. A* **72** 022723
- [116] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Zhou X X, Wang J G 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 245204
- [117] Goeke J, Hanne G F, Kessler J 1989 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **22** 1075
- [118] Beiersdorfer P, Osterheld A L, Chen M H, Henderson J R, Knapp D A, Levine M A, Marrs R E, Reed K J, Schneider M B, Vogel D A 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1995
- [119] Takács E, Meyer E S, Gillaspay J D, Roberts J R, Chantler C T, Hudson L T, Deslattes R D, Brown C M, Laming J M, Dubau J, Inal M K 1996 *Phys. Rev. A* **54** 1342
- [120] Dyl D, Dziczek D, Piwinski M, Gradziel M, Srivastava R, Dygdala R S, Chwirot S 1999 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **32** 837
- [121] Srivastava R, Blumy K, McEachranz R P, Stauffer A D 1996 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **29** 3513
- [122] Sohn M, Hanne G F 1992 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **25** 4627
- [123] Li B W, Jiang J, Dong C Z, Wang J G, Ding X B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5274 (in Chinese) [李博文, 蒋军, 董晨钟, 王建国, 丁晓彬 2009 物理学报 **58** 5274]
- [124] Whitten B L, Lane N F, Weisheit J C 1984 *Phys. Rev. A* **29** 945
- [125] Murillo M S, Weisheit J C 1998 *Phys. Rep.* **302** 1
- [126] Hu F 2021 *Radiat. Phys. Chem.* **180** 109293
- [127] Pindzola M S, Loch S D, Colgan J, Fontes C J 2008 *Phys. Rev. A* **77** 062707
- [128] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 023401

SPECIAL TOPIC—Dynamics of atoms and molecules at extremes

Fully relativistic distorted-wave method of studying electron-atom collision excitation process^{*}

LI Wenbo LI Bingbing CHEN Hao XIE Luyou WU Zhongwen

DING Xiaobin ZHANG Denghong JIANG Jun[†] DONG Chenzhong[‡]

(Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070 China)

(Received 20 October 2024; revised manuscript received 2 December 2024)

Abstract

The electron-atom (ion) collision excitation process is one of the most common inelastic scattering processes. It is of great significance in the fields of astrophysics and laboratory plasma. The relativistic distorted-wave method is a widely used theoretical tool for studying electron-atom (ion) collisions, with the aim of obtaining scattering parameters, such as impact cross sections and rate coefficients.

In recent years, we have developed a set of fully relativistic distorted-wave methods and programs of studying the electron-atom collision excitation processes. This method is based on the multi-configuration Dirac-

^{*} Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2022YFA1602500) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12064041, 12174315, 12274352, 12364034, 12174316, 12374384).

[†] Corresponding author. E-mail: phyjiang@yeah.net

[‡] Corresponding author. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

Hartree-Fock (MCDHF) method, together with the corresponding packages GRASP 92/2K/2018 and RATIP. In the present work, continuum state wave functions, total and differential cross sections, state multipoles, integral and differential Stokes parameters of the radiation photon after the impact excitation processes of polarized electrons and atoms are calculated. The influences of electron correlation effects, Breit interaction, and plasma screening effects on the excitation cross sections are discussed. The present methods and programs possess several advantages below.

1) In the calculations of the continuum electron wave functions, the direct interaction and exchange interaction between the bound electron and the continuum electron are both included. Then, the anti-symmetrized coupling wave function, which is composed of the continuum electron wave function and the continuum ion wave function, is utilized as the wave function of the system. This method is employed to study the low-energy electron scattering process and medium energy electron scattering process.

2) In this method, the target state wave function is obtained from the MCDHF theory and the corresponding GRASP packages. The MCDHF method has the advantage of being able to consider the electron correlation effects, including valence-valence, core-valence, and core-core correlations, as well as the influence of Breit interaction and quantum electrodynamics effect on the target state wave function. Furthermore, the calculation of the collision excitation matrix elements also includes the contribution of the Breit interaction. Consequently, the present method integrates the advantages of both the MCDHF method and distorted-wave method, thus is made suitable for studying the scattering processes of highly charged ions. In addition, it facilitates the study of the influence of higher-order effects on the collision dynamics, thereby obtaining high-precision theoretical data.

3) The current method and program can also be utilized to study the scattering cross section of electron-atom collision excitation processes, as well as the influence of plasma screening effects on collision excitation. Furthermore, the state multipoles, differential Stokes parameters, integral Stokes parameters, and orientation parameters of electron-complex atom collision excitation can be studied in detail by using the present method and program.

Keywords: collision excitation of electron-atom, relativistic distorted-wave method, multi-configuration Dirac-Hartree-Fock method

PACS: 34.80.Dp, 34.50.Fa

DOI: [10.7498/aps.74.20241467](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241467)

CSTR: [32037.14.aps.74.20241467](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20241467)

相对论扭曲波方法研究电子与原子碰撞激发过程

李文博 李兵兵 陈浩 颌录有 武中文 丁晓彬 张登红 蒋军 董晨钟

Fully relativistic distorted-wave method of studying electron-atom collision excitation process

LI Wenbo LI Bingbing CHEN Hao XIE Luyou WU Zhongwen DING Xiaobin ZHANG Denghong
JIANG Jun DONG Chenzhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 033401 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241467

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241467>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于实稳定方法的原子核单粒子共振相对论Hartree-Fock模型

Relativistic Hartree-Fock model of nuclear single-particle resonances based on real stabilization method

物理学报. 2024, 73(6): 062102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231632>

中高Z元素原子、离子的电子碰撞电离与激发截面快速计算方法

Fast computation approach of electron-impact ionization and excitation cross-sections for atoms and ions with medium- and high-Z elements

物理学报. 2024, 73(10): 103104 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240213>

相对论重离子碰撞中的手征效应实验研究

Progress on the experimental search for the chiral magnetic effect, the chiral vortical effect, and the chiral magnetic wave

物理学报. 2023, 72(11): 112504 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230109>

相对论重离子碰撞中 π 介子椭圆流劈裂

Elliptic flow splitting of charged pions in relativistic heavy-ion collisions

物理学报. 2023, 72(13): 132101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230454>

吉瓦级强流相对论多注电子束二极管的优化设计与实验研究

Optimal design and experimental research of several-gigawatt multiple electron beam diode

物理学报. 2021, 70(3): 038401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201336>

相对论重离子碰撞中的喷注淬火效应

Jet quenching effect in relativistic heavy-ion collisions

物理学报. 2023, 72(20): 200304 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230993>