

专题: 原子分子和材料物性数据

高电荷态 N^{6+} 离子与 H 原子碰撞中态选择 电荷交换过程理论研究*

牛佳洁¹⁾ 张唯唯¹⁾ 祁月盈^{2)†} 高俊文^{1)‡}

1) (杭州师范大学物理学院, 杭州 311121)

2) (嘉兴大学机械工程学院, 嘉兴 314001)

(2025 年 4 月 24 日收到; 2025 年 5 月 15 日收到修改稿)

本研究采用双电子半经典渐近态强耦合方法, 系统研究了 $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞体系在 0.25—225 keV/u 能区内的单电子俘获过程. 计算得到了自旋平均与自旋分辨的总截面、主量子数 n 分辨以及轨道量子数 nl 分辨的截面数据, 并与现有实验结果及多种理论方法的计算结果进行系统对比分析. 计算结果表明, 总截面在低能区对能量依赖性较弱, 而在高能区则呈现单调递减趋势. 态分辨截面分析显示, 低能区各子壳层之间存在显著的多通道耦合效应; 而在中高能区, 截面在轨道量子数 ℓ 上的分布趋近于统计规律, 即电子更倾向于被俘获至具有较高 ℓ 值的轨道. 研究结果进一步表明, 对高电荷态离子碰撞体系的准确建模需同时考虑高激发态通道间的耦合效应及电子关联作用. 然而, 不同理论方法在低能区表现出显著差异, 说明对进一步开展具备态分辨能力的实验测量有迫切需求. 本工作提供的截面数据, 对天体物理和实验室等离子的诊断建模研究具有重要参考意义. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00143> 中访问获取.

关键词: 电荷转移, 离子-原子碰撞, 电子关联**PACS:** 34.70.+e, 34.10.+x**DOI:** 10.7498/aps.74.20250541**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250541

1 引言

电荷交换 (charge exchange, CX), 亦称电子俘获, 指带电离子与中性原子或分子发生碰撞时, 离子从中性粒子中俘获一个或多个电子并形成高激发态的过程. 在特定碰撞速度区间内, 该过程可呈现量级达 10^{-15} cm² 的显著截面值^[1-3], 使其成为等离子体环境中的主导反应之一. 值得注意的是, 此类截面值会随入射离子的电荷态、碰撞能量乃至靶物质种类的变化而改变. 电荷交换形成激发态离子的辐射是等离子体诊断的重要探针: 在实验室

磁约束等离子体中, 中性束注入作为常规加热与诊断手段^[4,5], 其核心原理正是基于电荷交换复合光谱技术 (charge exchange recombination spectroscopy)^[6,7]. 该技术通过分析中性束与等离子体杂质间的电荷交换光谱, 被广泛应用于托卡马克 (Tokamak) 等离子体的离子温度、等离子体旋转速度及杂质密度测量^[7-9].

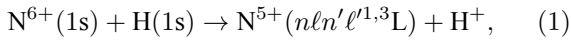
在天体物理领域, 电荷交换的重要性始于彗星 C/Hyakutake X 射线辐射的突破性发现^[10]. 研究表明, 此类辐射源于太阳风离子与彗星中性大气间的电荷交换碰撞过程^[11]. 此后, 针对电荷交换诱导 X 射线辐射的研究迅速扩展至太阳风离子与彗星、

* 国家自然科学基金 (批准号: 12374229) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yying_qi@zjxu.edu.cn‡ 通信作者. E-mail: gaojunwen@hznu.edu.cn

行星大气中性成分相互作用的界面区域^[12–20]. 太阳风作为日冕持续释放的带电粒子流, 主要包含电子、质子、 α 粒子及 $C^{(5,6)+}$, $N^{(5-7)+}$, $O^{(5-8)+}$, $S^{(5-11)+}$, $Ne^{(4-8)+}$, $Mg^{(3-10)+}$, $Si^{(5-10)+}$, $Fe^{(7-13)+}$ 等高电荷态离子^[21–23]. 不同天体物理环境中中性粒子的种类显著影响电荷交换过程: 例如彗星大气以水分子 (H_2O)、一氧化碳 (CO) 及其解离产物 (如 H_2 , H , O) 为主^[3,24]; 太阳风圈以氢、氦占优^[25]; 地冕以氢为主^[26,27]; 而火星晕则富含氢、氧成分^[28–30]. 因此, 研究高电荷态太阳风离子与各类中性粒子的碰撞过程, 对精确模拟天体物理等离子体环境的 X 射线辐射谱、诊断中性/离子密度分布、离子温度及电荷态分布等关键参数具有重要价值.

本工作开展了 $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞中的单电子俘获过程:



针对该碰撞系统, 已有多个研究团队开展了实验研究. Panov 等^[31] 基于氢炉气室靶技术, 在 0.43—5.09 keV/u 能区内若干能量点测量了单电子俘获总截面; Meyer 等^[32] 将总截面测量进一步拓展至 0.2—7.5 keV/u 宽域碰撞能区; 此外, Kearns 等^[33] 通过平移能谱技术 (translational energy spectroscopy, TES) 在 0.94 keV/u 单能点获取了能量转移谱. 但迄今为止, 由于实验技术存在的巨大挑战, 尚未见态分辨截面 (state-resolved cross sections) 及自旋分辨截面 (spin-resolved cross sections) 的实验报道. 在理论研究方面, 除了基于简单的朗道-齐纳 (Landau-Zener, LZ) 模型的计算^[31,33,34], Olson 与 Salop^[35] 采用经典轨迹蒙特卡罗 (classical trajectory Monte Carlo, CTMC) 方法计算了 30—150 keV/u 能区内 6 个能量点的截面值. Wu 等^[36] 通过全量子分子轨道强耦合 (quantum molecular orbital close-coupling, QMOCC) 方法, 系统计算了 10 meV/u—10 keV/u 能区的单电子俘获总截面及态选择截面, 并联合原子轨道强耦合 (atomic orbital close-coupling, AOCC) 与 CTMC 方法将总截面计算范围延伸至 160 keV/u; Igenbergs 等^[37] 进一步通过 AOCC 方法将理论预测上限提升至 500 keV/u. 最近, Zhang 等^[38] 基于尺度定律 (scaling law)^[3] 计算了 0.06—50 keV/u 的总截面. 尽管关于 $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞中电子俘获过程的总截面测量实验与理论研究已较为丰富, 现有

实验结果与理论计算, 以及不同的理论研究之间仍存在着显著差异, 这表明该碰撞体系尚未被充分理解, 需进一步深入探索.

在 0.25—225 keV/u 能区范围内, 本文对 $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞中电子俘获过程开展系统的研究. 该能区覆盖了许多天体物理等离子体与实验室磁约束等离子体的典型能量特征. 研究采用双电子半经典渐近态强耦合 (semiclassical asymptotic-state close-coupling, SCASCC) 方法, 并引入组态相互作用 (configuration interaction, CI) 处理电子关联效应, 突破了传统单电子近似的理论局限. 我们系统地给出了自旋平均 (spin-averaged) 与自旋分辨 (spin-resolved) 两种情形下的总截面及 nl 态分辨截面, 并在可能的情况下与已有的实验测量和理论计算结果进行比较, 同时讨论了与现有数据不一致的可能原因. 我们提供了一套完整且一致的 $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞电荷交换过程的截面数据, 这些数据对于解释天体物理等离子体与实验室磁约束等离子体环境中的发射光谱至关重要.

2 理论方法

在本工作中, 采用双电子 SCASCC 方法计算了 $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞中的电子俘获过程的截面. 该方法已有详细描述 (参见文献^[39–42]), 此处仅简要概述其主要特点. 双电子含时薛定谔方程 (time-dependent Schrödinger equation, TDSE) 表示为

$$\left[H - i \frac{\partial}{\partial t} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = 0. \quad (2)$$

这里, 电子哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1,2} \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_T(r_i) + V_P(r_i^p) \right] + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (3)$$

式中, \mathbf{r}_i 和 $\mathbf{r}_i^p = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}(t)$ 分别为电子相对于靶核和入射核的位置矢量, 相对位置 $\mathbf{R}(t)$ 采用直线恒定速度近似 $\mathbf{R}(t) = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$, 其中 \mathbf{b} 和 \mathbf{v} 分别表示碰撞参数和相对速度矢量; V_T 和 V_P 分别为电子与靶核和入射粒子核的相互作用势,

$$V_T(r_i) = -\frac{1}{r_i}, \quad V_P(r_i^p) = -\frac{7}{r_i^p}. \quad (4)$$

通过将波函数展开到由孤立靶和入射粒子的渐近态构成的基组上求解薛定谔方程:

$$\begin{aligned} & \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \\ &= \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{l=1}^{N_P} a_{kl}^{\text{TP}}(t) [\phi_k^{\text{T}}(\mathbf{r}_1) \phi_l^{\text{P}}(\mathbf{r}_2, t) \\ & \quad \pm \phi_k^{\text{T}}(\mathbf{r}_2) \phi_l^{\text{P}}(\mathbf{r}_1, t)] e^{-i(E_k^{\text{T}} + E_l^{\text{P}})t} \\ & \quad + \sum_{j=1}^{N_{\text{PP}}} a_j^{\text{PP}}(t) \Phi_j^{\text{PP}, \pm}(\mathbf{r}_{11}, \mathbf{r}_2, t) e^{-iE_j^{\text{PP}}t}, \quad (5) \end{aligned}$$

式中, 上标 T(P) 和 PP 的变量 ϕ 和 E 分别表示单、双电子处于靶核 (入射核) 的态及对应的能量, $N_T(N_P)$ 和 N_{PP} 为相应态的数量. 需指出, 当前计算未包含靶 (H) 的双电子态, 因其形成概率远低于电子俘获过程, 即 (1) 式所述过程. (5) 式中 \pm 号分别对应单重态与三重态自旋对称性, 波函数 $\Phi_j^{\text{PP}, \pm}$ 与相应自旋对称性相关联. 入射核态包含平面波电子平动因子 (electron translation factors, ETFs), $e^{i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_i - i\frac{1}{2}v^2t}$, 以保证伽利略不变性.

将 (5) 式代入 (2) 式可得一阶耦合微分方程组:

$$i \frac{d}{dt} \mathbf{a}(t) = \mathbf{S}^{-1}(\mathbf{b}, \mathbf{v}, t) \mathbf{M}(\mathbf{b}, \mathbf{v}, t) \mathbf{a}(t), \quad (6)$$

其中 $\mathbf{a}(t)$ 为含时展开系数列向量 (即 (5) 式中 a^{PP} 和 a^{TP}), \mathbf{S} 和 \mathbf{M} 分别为重叠矩阵与耦合矩阵. \mathbf{M} 中包含所有双电子耦合项 (尤其是含双电子 ETF 的双中心的复杂的耦合项), 且在双电子态 (PP) 对角化过程中未采用任何近似 (远超 Hartree-Fock 方法), 形成严格的组态相互作用 (configuration interaction, CI) 框架.

采用预测-校正变步长 Adams-Bashford-Moulton 方法求解耦合方程组 (初始条件为初态 i 、碰撞参数 b 和速度 v). 特定跃迁过程的态-态积分截面通过下式计算:

$$\sigma_{fi}(v) = 2\pi \int_0^{+\infty} b |a_f(+\infty)|^2 db. \quad (7)$$

由于总自旋守恒, 需分别求解单重态与三重态对应的耦合方程组. 最终截面通过统计权重 (单重态 $\frac{1}{4}$, 三重态 $\frac{3}{4}$) 加权求和, 得到可与实验直接比较的自旋平均截面.

在当前计算中, 采用高斯型轨道基组来描述孤立的靶和入射粒子的渐近态, 其中 N^{7+} 中心采用 92 个高斯型轨道基组 (其中 $\ell = 0$ 轨道 12 个, $\ell = 1$ 轨道按 m 分量展开为 7×3 个, $\ell = 2$ 轨道 4×5 个, $\ell = 3$ 轨道 3×7 个, $\ell = 4$ 轨道 2×9 个), H 中心布置 19 个高斯型轨道 ($\ell = 0$ 轨道 7 个, $\ell = 1$

轨道 4×3 个). 该基组体系允许在单重态对称性计算中纳入 3126 个物理态与赝态 [包含 H 和 N^{6+} 的 1340 个态、 N^{5+} 的 1786 个态], 在三重态对称性中则为 3107 个态 [包含 H 和 N^{6+} 的 1340 个态、 N^{5+} 的 1767 个态]. 这些电子态可有效描述弹性散射、单电子俘获、碰撞激发及电离等过程. 需指出, 本文是通过基组内电子哈密顿量的对角化计算得到电离阈值以上的赝连续态来近似描述电离过程.

3 结果与讨论

3.1 单电子俘获过程总截面

本工作系统地计算了 $N^{6+} + \text{H}$ 碰撞体系在 0.25—225 keV/u 能区内的自旋态平均单电子俘获总截面, 结果与已有的实验数据 [31,32,43] 和理论计算 [35–38] 对比如图 1 所示. 为便于数据应用, 将自旋态平均和自旋态分辨的总截面及态选择截面值分别整理于表 1—表 3. 在 0.1—10 keV/u 的低能区内, 截面随能量变化较为平缓; 而在 10 keV/u 以上, 截面随能量升高呈明显的单调递减趋势. 在高能区 (>100 keV/u), 本工作的计算结果与 AOCC 方法 [36,37] 和 CTMC 方法 [35,36] 得到的理论值高度一致. 在中间能区 (2—85 keV/u), 虽然与 Igenbergs 等 [37] 基于 AOCC 方法计算的结果在能量依赖趋势上具有一致性, 但其截面值整体略高于本工作, 最大偏差约为 25%. Wu 等 [36] 基于 AOCC 方法的

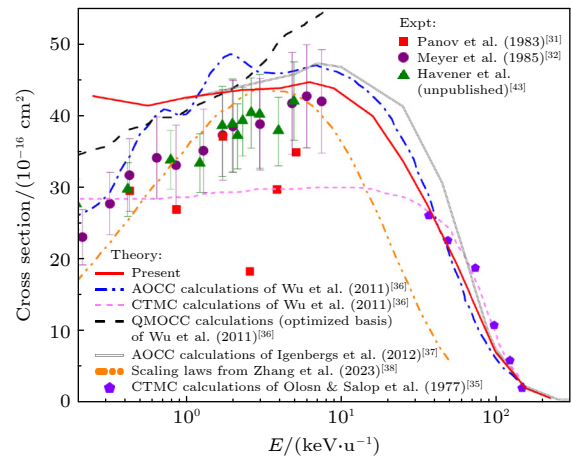


图 1 $N^{6+}(1s)$ 与 $\text{H}(1s)$ 碰撞自旋态平均单电子俘获总截面随碰撞能量的变化, 以及当前结果同已有的实验数据 [31,32,43] 和理论计算 [35–38] 的对比

Fig. 1. Spin-averaged total single-electron capture cross sections as a function of collision energy for $N^{6+}(1s) + \text{H}(1s)$ collisions. Present results are compared with experimental data [31,32,43] and theoretical calculations [35–38].

计算结果在 1—40 keV/u 范围内亦普遍高于本工作,而在 1 keV/u 以下则明显低于本文计算,最大相对差异超过 36%. 这些差异可能源于文献 [36,37] 中采用的 AOCC 方法基于单电子近似,使用模型势描述 $N^{6+}(1s)$ 同电子间的相互作用,未考虑电子关联效应和自旋态对俘获过程的影响. 此外, Wu 等 [36] 基于 CTMC 方法得到的截面在低于 40 keV/u 的能区明显低于本工作结果. 这种差异可归因于

CTMC 方法在低能区的已知局限性——无论采用何种初始分布,其均难以准确描述低能俘获过程,主要由于其在处理分子特征(如伪交叉, pseudo-crossings) 方面存在明显不足 [44]. 对于 Wu 等 [36] 基于 QMOCC 方法得到的截面,其在 2 keV/u 以上高于本工作,并在 8 keV/u 附近达到最大偏差(约 22%). 这一差异可能是由于 QMOCC 计算未引入 ETF 因子,而该因子的影响在较高能区更为显著.

表 1 不同碰撞能量 E (单位: keV/u) 下, $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞自旋平均的单电子俘获总截面和俘获至 $N^{5+}(1s\ n\ell)$ 态分辨截面 (单位: 10^{-16} cm^2)

Table 1. Spin-averaged total single-electron capture cross sections and state-resolved cross sections for capture into $N^{5+}(1s\ n\ell)$ states in $N^{6+}(1s) + H(1s)$ collisions at various collision energies E (unit: keV/u). All cross sections are given in units of 10^{-16} cm^2 .

E	1s3s	1s3p	1s3d	1s4s	1s4p	1s4d	1s4f	1s5s	1s5p	1s5d	1s5f	1s5g	总截面
0.25	0.0002	0.0002	0.0002	3.7648	12.7027	8.5685	13.3494	0.1747	0.6930	0.9648	0.4290	2.0774	42.7323
0.56	0.0002	0.0007	0.0013	6.4063	10.4408	5.2656	13.6226	0.2466	1.9896	0.9673	1.0273	1.4035	41.4063
1.00	0.0023	0.0054	0.0108	9.2673	9.5404	5.9963	11.9886	0.8304	0.9395	1.0427	1.9539	0.9143	42.5571
2.25	0.0273	0.0799	0.1115	7.5560	8.9939	7.4811	12.8323	0.6563	0.4619	0.4968	2.3590	2.3944	43.5764
4.00	0.0927	0.4714	0.2950	5.7645	8.3648	9.1302	12.2192	0.3532	0.4350	0.7830	2.5118	3.1321	43.8349
6.25	0.2357	0.6419	0.4629	3.3885	6.5808	10.4578	13.2696	0.4157	0.8553	0.9404	2.9255	4.2443	44.7038
9.00	0.3394	0.6624	0.5941	1.8598	4.7615	9.9354	14.5785	0.2967	0.7135	1.1683	2.7464	5.8699	43.8333
16.00	0.3529	0.9129	1.1518	0.6615	2.6646	7.6238	14.9072	0.1737	0.5804	1.4345	2.9620	5.9363	39.9444
25.00	0.3508	1.0430	1.6138	0.3115	1.5698	4.7657	12.1202	0.1464	0.5298	1.3658	3.1366	5.4187	33.7083
36.00	0.2659	0.9920	1.7688	0.1915	0.9180	2.7773	8.3503	0.1050	0.4919	1.1551	2.9266	4.6950	27.5872
56.25	0.1245	0.5889	1.5077	0.0920	0.4132	1.1599	4.1918	0.0741	0.4061	0.7697	2.0000	2.7565	19.0517
100.00	0.0250	0.1622	0.6719	0.0243	0.1261	0.4415	0.9926	0.0292	0.1383	0.3505	0.7732	0.6489	6.8768
156.25	0.0103	0.0393	0.2537	0.0096	0.0326	0.1687	0.1934	0.0105	0.0340	0.1390	0.2303	0.1001	1.8768
225.00	0.0035	0.0209	0.0742	0.0026	0.0170	0.0480	0.0392	0.0022	0.0130	0.0392	0.0594	0.0148	0.5114

表 2 不同碰撞能量 E (单位: keV/u) 下, $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞自旋单重态下的单电子俘获总截面和俘获至 $N^{5+}(1s\ n\ell\ ^1L)$ 态分辨截面 (单位: 10^{-16} cm^2)

Table 2. Spin-singlet total single-electron capture cross sections and state-resolved cross sections for capture into $N^{5+}(1s\ n\ell\ ^1L)$ states in $N^{6+}(1s) + H(1s)$ collisions at various collision energies E (unit: keV/u). All cross sections are given in units of 10^{-16} cm^2 .

E	1s3s ¹ S	1s3p ¹ P	1s3d ¹ D	1s4s ¹ S	1s4p ¹ P	1s4d ¹ D	1s4f ¹ F	1s5s ¹ S	1s5p ¹ P	1s5d ¹ D	1s5f ¹ F	1s5g ¹ G	总截面 ¹ L
0.25	0.0001	0.0002	0.0002	4.9841	4.1948	6.0168	13.7765	0.1364	1.1173	0.7492	0.4985	3.0177	34.5024
0.56	0.0003	0.0010	0.0013	6.6345	3.7956	8.0072	13.0620	0.3696	1.9096	1.1744	1.0736	1.6679	37.7347
1.00	0.0023	0.0073	0.0076	8.8291	4.8926	9.4065	12.8317	0.9635	1.1060	0.8840	1.9907	0.9559	41.9406
2.25	0.0314	0.0879	0.0599	6.6027	5.3151	11.9836	14.0620	0.6144	0.5642	0.4328	2.4516	2.4166	44.7399
4.00	0.1416	0.4313	0.2924	5.0184	5.9133	12.5596	13.2306	0.2941	0.4484	0.7915	2.4992	3.1441	45.0342
6.25	0.3049	0.6447	0.4420	2.8775	5.0788	12.7611	14.0163	0.3535	0.7570	0.9597	2.8547	4.2684	45.5828
9.00	0.3949	0.7666	0.6046	1.5960	3.9072	11.1796	15.1420	0.2527	0.6901	1.1460	2.6755	5.7122	44.3560
16.00	0.3889	1.0895	1.2582	0.5916	2.5040	7.9453	14.9587	0.1480	0.6129	1.3966	2.9507	5.7149	40.1231
25.00	0.3696	1.1997	1.7008	0.2885	1.6088	4.8367	11.9200	0.1366	0.5699	1.3379	3.0703	5.4103	33.7599
36.00	0.2757	1.1118	1.8295	0.1861	0.9715	2.7831	8.2105	0.0998	0.5225	1.1366	2.8470	4.7282	27.6453
56.25	0.1240	0.6285	1.5212	0.0906	0.4484	1.1474	4.1679	0.0700	0.4274	0.7624	1.9865	2.7557	19.0999
100.00	0.0249	0.1684	0.6648	0.0245	0.1309	0.4330	0.9952	0.0297	0.1417	0.3476	0.7773	0.6477	6.8638
156.25	0.0101	0.0413	0.2503	0.0092	0.0340	0.1657	0.1940	0.0101	0.0347	0.1368	0.2312	0.1003	1.8767
225.00	0.0033	0.0222	0.0735	0.0024	0.0180	0.0474	0.0392	0.0021	0.0136	0.0387	0.0594	0.0148	0.5149

表 3 不同碰撞能量 E (单位: keV/u) 下, $N^{6+}(1s)$ 离子与 $H(1s)$ 原子碰撞自旋三重态下的单电子俘获总截面和俘获至 $N^{5+}(1s\ n\ell\ ^3L)$ 态分辨截面 (单位: 10^{-16} cm^2)

Table 3. Spin-triplet total single-electron capture cross sections and state-resolved cross sections for capture into $N^{5+}(1s\ n\ell\ ^3L)$ states in $N^{6+}(1s) + H(1s)$ collisions at various collision energies E (unit: keV/u). All cross sections are given in units of 10^{-16} cm^2 .

E	1s3s 3S	1s3p 3P	1s3d 3D	1s4s 3S	1s4p 3P	1s4d 3D	1s4f 3F	1s5s 3S	1s5p 3P	1s5d 3D	1s5f 3F	1s5g 3G	总截面 3L
0.25	0.0002	0.0002	0.0002	3.3584	15.5386	9.4191	13.2070	0.1875	0.5515	1.0366	0.4058	1.7640	45.4756
0.56	0.0002	0.0006	0.0013	6.3302	12.6558	4.3517	13.8094	0.2056	2.0162	0.8983	1.0119	1.3154	42.6301
1.00	0.0022	0.0048	0.0119	9.4133	11.0897	4.8596	11.7075	0.7860	0.8840	1.0955	1.9416	0.9004	42.7626
2.25	0.0260	0.0772	0.1287	7.8738	10.2202	5.9803	12.4224	0.6703	0.4279	0.5181	2.3282	2.3870	43.1886
4.00	0.0764	0.4847	0.2958	6.0132	9.1819	7.9870	11.8821	0.3729	0.4305	0.7801	2.5160	3.1281	43.4352
6.25	0.2126	0.6409	0.4699	3.5588	7.0815	9.6901	13.0207	0.4365	0.8881	0.9340	2.9492	4.2362	44.4108
9.00	0.3208	0.6277	0.5906	1.9477	5.0463	9.5207	14.3906	0.3114	0.7213	1.1757	2.7700	5.9224	43.6591
16.00	0.3409	0.8540	1.1163	0.6848	2.7181	7.5166	14.8900	0.1822	0.5696	1.4472	2.9658	6.0101	39.8848
25.00	0.3445	0.9908	1.5849	0.3192	1.5568	4.7420	12.1870	0.1497	0.5165	1.3750	3.1587	5.4216	33.6911
36.00	0.2626	0.9520	1.7486	0.1933	0.9002	2.7754	8.3969	0.1067	0.4817	1.1613	2.9532	4.6839	27.5678
56.25	0.1247	0.5757	1.5031	0.0924	0.4014	1.1641	4.1998	0.0755	0.3991	0.7721	2.0045	2.7568	19.0356
100.00	0.0250	0.1601	0.6743	0.0243	0.1245	0.4443	0.9917	0.0290	0.1372	0.3515	0.7718	0.6493	6.8811
156.25	0.0104	0.0387	0.2549	0.0098	0.0321	0.1697	0.1932	0.0106	0.0338	0.1398	0.2300	0.1001	1.8769
225.00	0.0036	0.0204	0.0745	0.0027	0.0167	0.0482	0.0392	0.0023	0.0127	0.0394	0.0595	0.0148	0.5102

在能量低于 2 keV/u 时, QMOCC 结果则低于本工作. 进一步分析 $n\ell$ 分辨的态选择截面发现 (见图 3), 这种差异主要源于 QMOCC 方法对俘获至 4f 态的截面预测显著偏低. 因此, 进一步开展具有态分辨能力的实验测量对于验证低能区不同理论方法的可靠性具有重要意义.

与现有实验数据进行对比显示, 本工作的截面值与 Meyer 等^[32] 和 Havener 等^[43] (数据取自文献^[36]) 实验数据在 1.5—8 keV/u 范围内基本一致, 均落在实验误差范围内. 然而在低于 1.5 keV/u 的能区, 这两组实验数据均低于本工作和 QMOCC 方法的预测值. 这一低能区的差异尚无明确定论, 可能受到多种因素的影响. 一方面, 对于高电荷态离子与氢原子的碰撞体系, 在电荷交换发生后, 生成的质子可能受到残余 N^{6+} 离子束以及生成的 N^{5+} 离子的强库仑斥力影响, 从而产生较大角度的散射. 实验中可能由于信号采集过程中对大角度散射事件的遗漏, 导致截面被低估. 另一方面, 理论计算也可能存在一定偏差, 例如本工作在低能区采用的直线轨迹近似可能带来误差; 而 QMOCC 计算中则可能存在势能 (尤其是在避免交叉区域)、非绝热耦合以及耦合相位等方面的计算不确定性^[36]. 此外, 需要指出的是, Panov 等^[31] 所测得的实验数据在能量变化趋势上表现出较强的波动性, 且与其他实验及理论结果存在较大偏差, 其可靠性仍需进一步验证.

3.2 单电子俘获过程态选择截面

本工作进一步开展了主量子数 n 及轨道量子数 $n\ell$ 分辨的电子俘获过程研究, 以揭示终态分布特征. 该分布直接影响跃迁过程中特征辐射谱线性质, 对天体物理等离子体辐射输运过程的建模和实验室等离子体诊断具有重要价值.

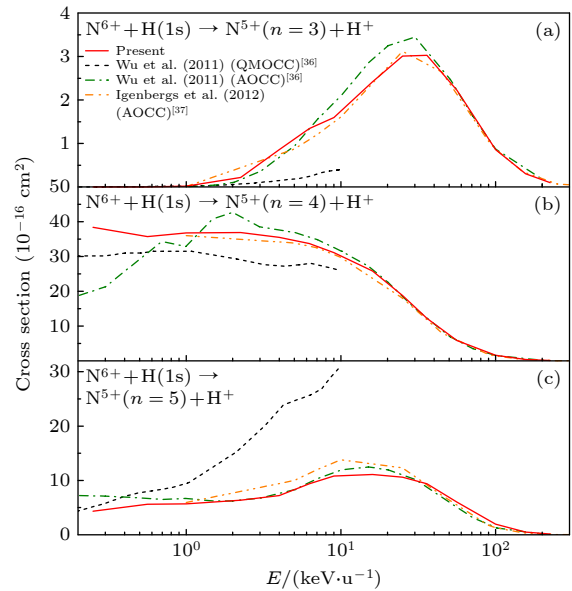


图 2 $N^{6+}(1s)$ 与 $H(1s)$ 碰撞自旋平均的主量子数 n 分辨单电子俘获截面随碰撞能量的变化, 以及当前结果同已有理论计算^[36,37] 对比 (a) $n = 3$; (b) $n = 4$; (c) $n = 5$

Fig. 2. Spin-averaged n -resolved single-electron capture cross sections as a function of collision energy for $N^{6+}(1s) + H(1s)$ collisions: (a) $n = 3$, (b) $n = 4$, (c) $n = 5$. Present results are compared with theoretical calculations^[36,37].

图 2 展示了 $N^{6+} + H$ 碰撞体系中自旋平均的主量子数 n 分辨单电子俘获截面与现有理论计算^[36,37]的对比分析. 本文计算结果表明, 40 keV/u 以下能区俘获主要分布于 $n = 4$ 通道, 高于 40 keV/u 时 $n = 4$ 与 $n = 5$ 通道截面趋于接近. 与 Igenbergs 等^[37]的 AOCC 计算结果相比, $n = 3, 4, 5$ 三个主要通道整体趋势一致, 但低于 30 keV/u 时其 $n = 5$ 通道截面略高于当前计算. Wu 等^[36]的 AOCC 计算结果在低能区 (尤其 <1 keV/u) 对最重要 $n = 4$ 通道截面的预测存在着明显偏离, 最大偏差约 50%; 而在 1—10 keV/u 范围内, 其结果亦略高于本文计算值. QMOCC 方法计算得到的 $n = 3, 4$ 和 5 通道的俘获截面与本文结果均存在较大差异, 相关讨论将在后续 nl 分辨截面对比中展开.

图 3 所示为自旋平均的轨道量子数 nl 分辨单电子俘获截面的对比分析. 当前的计算结果表明, 低能区相同主量子数 n 的不同轨道量子数 l 子壳层

间存在显著耦合效应; 而在中高能区, 截面相对角动量 (l) 分布均近似遵循统计角动量分布, 即电子更倾向于被俘获至具有较大 l 值的子壳层中. 在 $3l, 5s$ 以及主导的 $4f$ 通道上, 本工作与 Igenbergs 等^[37]的 AOCC 结果在整个重叠能区呈现良好一致性. 然而, Igenbergs 等^[37]在 10 keV/u 下计算的 $4s$ 与 $4p$ 通道的截面略低于当前结果, 而 $4d$ 及 $5l$ (除 $5s$ 外) 通道在中低能区计算值则相对偏高. 这些差异可能源于其 AOCC 方法采用了单电子近似, 利用模型势描述 $N^{6+}(1s)$ -电子相互作用, 未考虑电子关联效应和自旋态对电子俘获过程的影响. Wu 等^[36]基于 QM-OCC 方法的结果与本文的计算在整体上存在显著差异, 尤其是以主导的 $4f$ 通道最为明显, 最大差异达 3—4 倍. 该差异可能来自于多通道耦合效应, QMOCC 仅包含 A_1 对称性下的 16 个 $^1\Sigma^+$ 态、15 个 $^3\Sigma^+$ 态, 以及 B_1 对称性下的 10 个 $^1\Pi$ 和 10 个 $^3\Pi$ 态, 而本工作的计算包含了

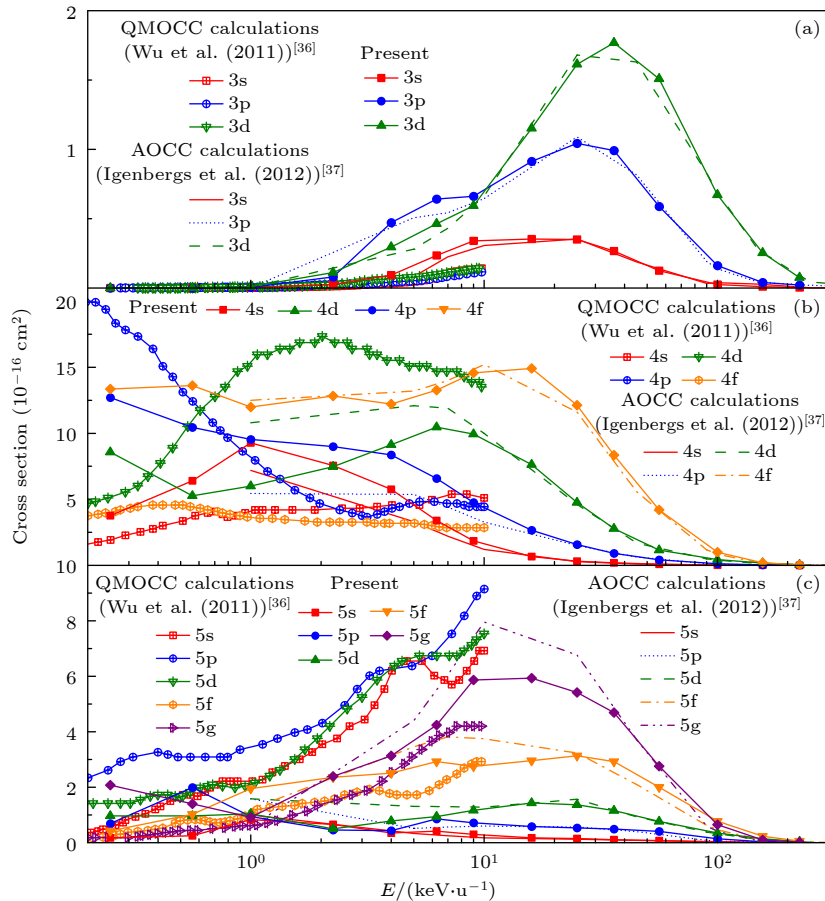


图 3 $N^{6+}(1s)$ 与 $H(1s)$ 碰撞中自旋平均的轨道量子数 nl 分辨单电子俘获截面随碰撞能量的变化, 以及本工作计算结果同已有的理论计算^[36,37]对比 (a) $3l$ 态; (b) $4l$ 态; (c) $5l$ 态

Fig. 3. Spin-averaged nl -resolved single-electron capture cross sections as a function of collision energy for $N^{6+}(1s) + H(1s)$ collisions: (a) $3l$; (b) $4l$; (c) $5l$. Present results are compared with theoretical calculations^[36,37].

3126 个单重态和 3107 个三重态通道. 需指出, 本工作采用的直线轨迹近似在低能区可能引入误差, 未来通过具有态分辨能力的实验测量, 如冷靶反冲离子动量谱仪 (COLTRIMS)^[45–49], 可有效验证低能区不同理论方法的准确性.

4 结 论

本研究基于双电子半经典渐近态强耦合方法, 结合组态相互作用处理电子关联效应, 对 N^{6+} 离子和 H 原子碰撞体系的电子俘获过程进行了全面研究. 在 0.25—225 keV/u 能区范围内, 系统地获得了自旋平均与自旋分辨的总截面、主量子数 n 及轨道量子数 nl 态分辨截面, 并与现有实验数据和理论计算结果进行对比. 研究表明, 高电荷态离子碰撞体系的精确描述必须同时考虑高激发态通道耦合效应和电子关联效应. 对于自旋平均的单电子俘获总截面, 其在低能区对能量依赖性较弱, 而在高能区则呈现单调递减趋势. 对于自旋平均的态分辨截面, 其在中高能区, 截面相对角动量 (ℓ) 分布均近似遵循统计角动量分布, 即电子更倾向于被俘获至具有较大 ℓ 值的子壳层中. 而在低能区, 不同理论方法间的显著差异突显了对该碰撞体系进一步开展态分辨实验测量的必要性. 本工作提供的丰富截面数据将为天体物理等离子体辐射建模与实验室等离子体诊断研究提供重要的理论参考.

数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00143> 中访问获取.

参考文献

- [1] Fritsch W, Lin C D 1991 *Phys. Rep.* **202** 1
- [2] Fogle M, Wulf D, Morgan K, McCammon D, Seely D G, Draganić I N, Havener C C 2014 *Phys. Rev. A* **89** 042705
- [3] Gu L, Kaastra J, Raassen A J J 2016 *A&A* **588** A52
- [4] Anderson H, von Hellermann M G, Hoekstra R, Horton L D, Howman A C, König R W T, Martin R, Olson R E, Summers H P 2000 *Plasma Phys. Control. Fusion* **42** 781
- [5] Delabie E, Brix M, Giroud C, Jaspers R J E, Marchuk O, O'Mullane M G, Ralchenko Y, Surrey E, von Hellermann M G, Zastrow K D, Contributors J E 2010 *Plasma Phys. Control. Fusion* **52** 125008
- [6] Isler R C 1977 *Phys. Rev. Lett.* **38** 1359
- [7] Isler R C 1994 *Plasma Phys. Control. Fusion* **36** 171
- [8] von Hellermann M G, Bertschinger G, Biel W, Giroud C, Jaspers R, Jupen C, Marchuk O, Mullane M O, Summers H

- P, Whiteford A, Zastrow K D 2005 *Phys. Scr.* **2005** 19
- [9] McDermott R M, Dux R, Pütterich T, Geiger B, Kappatou A, Lebschy A, Bruhn C, Cavedon M, Frank A, Harder N D, Viezzer E, the A U T 2018 *Plasma Phys. Control. Fusion* **60** 095007
- [10] Lisse C M, Dennerl K, Enghauser J, Harden M, Marshall F E, Mumma M J, Petre R, Pye J P, Ricketts M J, Schmitt J, Trumper J, West R G 1996 *Science* **274** 205
- [11] Cravens T E 1997 *Geophys. Res. Lett.* **24** 105
- [12] Hoekstra R, Anderson H, Blik F W, Hellermann M v, Maggi C F, Olson R E, Summers H P 1998 *Plasma Phys. Control. Fusion* **40** 1541
- [13] Cravens T E 2000 *Astrophys. J.* **532** L153
- [14] Cravens T E 2002 *Science* **296** 1042
- [15] Holmstrom M, Barabash S, Kallio E 2001 *Geophys. Res. Lett.* **28** 1287
- [16] Beiersdorfer P, Boyce K R, Brown G V, Chen H, Kahn S M, Kelley R L, May M, Olson R E, Porter F S, Stahle C K, Tillotson W A 2003 *Science* **300** 1558
- [17] Lallement R 2004 *A&A* **418** 143
- [18] Branduardi-Raymont G, Bhardwaj A, Elsner R F, Gladstone G R, Ramsay G, Rodriguez P, Soria R, Waite Jr J H, Cravens T E 2007 *A&A* **463** 761
- [19] Robertson I P, Kuntz K D, Collier M R, Cravens T E, Snowden S L 2009 *AIP Conference Proceedings* **1156** 52
- [20] Wargelin B J, Kornbleuth M, Martin P L, Juda M 2014 *Astrophys. J.* **796** 28
- [21] Audard M, Behar E, Güdel M, Raassen A J J, Porquet D, Mewe R, Foley C R, Bromage G E 2001 *A&A* **365** L329
- [22] Schwadron N A, Cravens T E 2000 *Astrophys. J.* **544** 558
- [23] Mawhorter R J, Chutjian A, Cravens T E, Djurić N, Hossain S, Lisse C M, MacAskill J A, Smith S J, Simicic J, Williams I D 2007 *Phys. Rev. A* **75** 032704
- [24] Bodewits D, Hoekstra R, Seredyuk B, McCullough R W, Jones G H, Tielens A G G M 2006 *Astrophys. J.* **642** 593
- [25] Galeazzi M, Chiao M, Collier M R, Cravens T, Koutroumpa D, Kuntz K D, Lallement R, Lepri S T, McCammon D, Morgan K, Porter F S, Robertson I P, Snowden S L, Thomas N E, Uprety Y, Ursino E, Walsh B M 2014 *Nature* **512** 171
- [26] Carruthers G R, Page T, Meier R R 1976 *J. Geophys. Res.* **81** 1664
- [27] Rairden R L, Frank L A, Craven J D 1986 *J. Geophys. Res.* **91** 13613
- [28] Dennerl K, Lisse C M, Bhardwaj A, Burwitz V, Enghauser J, Gumell H, Holmström M, Jansen F, Kharchenko V, Rodríguez-Pascual P M 2006 *A&A* **451** 709
- [29] Koutroumpa D, Modolo R, Chanteur G, Chaufray J Y, Kharchenko V, Lallement R 2012 *A&A* **545** A153
- [30] Liang G Y, Sun T R, Lu H Y, Zhu X L, Wu Y, Li S B, Wei H G, Yuan D W, Zhong J Y, Cui W, Ma X W, Zhao G 2023 *Astrophys. J.* **943** 85
- [31] Panov M N, Basalae A A, Lozhkin K O 1983 *Phys. Scr.* **1983** 124
- [32] Meyer F W, Howald A M, Havener C C, Phaneuf R A 1985 *Phys. Rev. A* **32** 3310
- [33] Kearns D M, McCullough R W, Trassl R, Gilbody H B 2003 *J. Phys. B* **36** 3653
- [34] Cumber R S, Mullen P D, Lyons D, Shelton R L, Fogle M, Schultz D R, Stancil P C 2018 *Astrophys. J.* **852** 7
- [35] Olson R E, Salop A 1977 *Phys. Rev. A* **16** 531
- [36] Wu Y, Stancil P C, Liebermann H P, Funke P, Rai S N, Bueker R J, Schultz D R, Hui Y, Draganić I N, Havener C C 2011 *Phys. Rev. A* **84** 022711

- [37] Igenbergs K, Schweinzer J, Veiter A, Perneczky L, Fröhlich E, Wallerberger M, Olson R E, Aumayr F 2012 *J. Phys. B* **45** 065203
- [38] Zhang R T, Liao T, Zhang C J, Zou L P, Guo D L, Gao Y, Gu L Y, Zhu X L, Zhang S F, Ma X 2023 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **520** 1417
- [39] Sisourat N, Pilskog I, Dubois A 2011 *Phys. Rev. A* **84** 052722
- [40] Gao J W, Wu Y, Sisourat N, Wang J G, Dubois A 2017 *Phys. Rev. A* **96** 052703
- [41] Gao J W, Qi Y Y, Wu Y, Wang J G 2023 *Astrophys. J.* **944** 167
- [42] Gao J W, Qi Y Y, Wu Y, Wang J G, Sisourat N, Dubois A 2024 *Phys. Rev. A* **109** 012801
- [43] Havener C C D I N, Schultz D R, Wu Y, Stancil P C (unpublished, the data is taken from Ref. [36].)
- [44] Errea L F, Guzmán F, Illescas C, Méndez L, Pons B, Riera A, Suárez J 2006 *Plasma Phys. Control. Fusion* **48** 1585
- [45] Ullrich J, Moshhammer R, Dorn A, Dörner R, Schmidt L P H, Schmidt-Böcking H 2003 *Rep. Prog. Phys.* **66** 1463
- [46] Wei B, Zhang R 2025 *Sci. Sin. Phys. Mech. Astron.* **55** 250008 (in Chinese) [魏宝仁, 张瑞田 2025 中国科学: 物理学力学天文学 **55** 250008]
- [47] Wu Y J, Meng T M, Zhang X W, Tan X, Ma P F, Yin H, Ren B H, Tu B S, Zhang R T, Xiao J, Ma X W, Zou Y M, Wei B R 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 240701 (in Chinese) [吴怡娇, 孟天鸣, 张献文, 谭旭, 马蒲芳, 殷浩, 任百惠, 屠秉晟, 张瑞田, 肖君, 马新文, 邹亚明, 魏宝仁 2024 物理学报 **73** 240701]
- [48] Zhu X L, Cui S C, Xing D D, Xu J W, Najjari B, Zhao D M, Guo D L, Gao Y, Zhang R T, Su M G, Zhang S F, Ma X W 2024 *Chin. Phys. B* **33** 023401
- [49] 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

SPECIAL TOPIC—Atomic, molecular and materials properties data

Theoretical study of state-selective charge exchange processes in collisions between highly charged N^{6+} ions and H atoms^{*}

NIU Jiajie¹⁾ ZHANG Weiwei¹⁾ QI Yueying^{2)†} GAO Junwen^{1)‡}1) (*School of Physics, Hangzhou Normal University, Hangzhou 311121, China*)2) (*College of Mechanical Engineering, Jiaying University, Jiaying 314001, China*)

(Received 24 April 2025; revised manuscript received 15 May 2025)

Abstract

In this work, we systematically investigate single-electron capture process in the collision between $N^{6+}(1s)$ ions and $H(1s)$ atoms in a wide energy range from 0.25 to 225 keV/u by using a two-electron semiclassical asymptotic-state close-coupling method. Spin-averaged and spin-resolved total cross sections, as well as n -resolved and $n\ell$ -resolved partial cross sections, are calculated and comprehensively compared with existing experimental measurements and theoretical predictions. The results show at low energies (<10 keV/u), energy dependence of the total cross section is weak, and it follows a monotonically decreasing trend at higher energies. The analysis of $n\ell$ -resolved cross sections reveals the strong coupling effects between various channels at low energies, while at high energies the relative ℓ distributions in each $n\ell$ -resolved cross section approximately follow the statistical ℓ distribution, for which the electrons are therefore mainly captured into subshells of the maximum ℓ . The present study demonstrates the importance of a two-electron treatment taking into account electronic correlation and the use of extended basis sets in the close-coupling scheme. However, substantial discrepancies exist among theoretical approaches at low energies. It is clear that further experimental and theoretical efforts are required to draw definite conclusions. Our work provides a complete and consistent set of cross sections in a broad range of collision energies, which can be used for various plasma diagnosis and modeling. The datasets presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00143>.

Keywords: charge transfer, ion-atom collisions, electron correlations**PACS:** 34.70.+e, 34.10.+x**DOI:** 10.7498/aps.74.20250541**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250541

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12374229).

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

‡ Corresponding author. E-mail: gaojunwen@hznu.edu.cn

高电荷态 N^{6+} 离子与H原子碰撞中态选择电荷交换过程理论研究

牛佳洁 张唯唯 祁月盈 高俊文

Theoretical study of state-selective charge exchange processes in collisions between highly charged N^{6+} ions and H atoms

NIU Jiajie ZHANG Weiwei QI Yueying GAO Junwen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 153402 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250541

CSTR: 32037.14.aps.74.20250541

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250541>

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

Au/CeO₂(111)表面吸附的电荷转移特性

Charge transfer characteristics of Au adsorption on CeO₂(111) surface

物理学报. 2025, 74(5): 053101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241522>

质子碰撞硼原子非辐射的电荷转移过程

Non-radiative charge transfer process of proton impinging B atom

物理学报. 2023, 72(16): 163401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230470>

高电荷态 Ar^{8+} 离子与He原子碰撞中双电子俘获量子态选择截面实验研究

Experimental measurement of state selective double electron capture in collision between 1.420 keV/u Ar^{8+} with He

物理学报. 2024, 73(24): 240701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241290>

竖直取向MoS₂纳米片复合Ag基底的表面增强拉曼光谱效应及机制

Surface enhanced Raman spectroscopy effect and mechanism of vertically oriented MoS₂ nanosheet composite with Ag substrate

物理学报. 2025, 74(5): 057402 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241671>

基于多体经典轨迹蒙特卡罗方法的 H^+ , Li^{3+} , Be^{4+} , O^{7+} 与He原子电荷交换过程

Charge transfer in collisions of H^+ , Li^{3+} , Be^{4+} and O^{7+} ions with He atom based on 4-classical trajectory Monte Carlo method

物理学报. 2022, 71(3): 035201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211470>

考虑共振电荷转移的离子引出过程理论研究

Numerical research on ion extraction with resonant charge exchange process

物理学报. 2021, 70(14): 145201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210105>