

专题: 原子分子和材料物性数据

低能区 N^{3+} 离子与 He 原子碰撞电荷转移截面研究*林晓贺^{1) #} 林敏娟^{2) #} 王堃⁵⁾ 吴勇³⁾ 任元¹⁾ 王瑜^{4) †} 李婕维⁶⁾

1) (航天工程大学, 北京 101416)

2) (齐齐哈尔大学理学院, 齐齐哈尔 161006)

3) (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)

4) (太原科技大学应用科学学院, 太原 030024)

5) (山西大学环境科学研究所, 太原 030006)

6) (重庆理工职业学院, 重庆 410320)

(2025 年 4 月 30 日收到; 2025 年 5 月 30 日收到修改稿)

N^{3+} 离子与基态 He 原子碰撞过程在天体物理、星际空间和实验室等离子体环境中具有重要研究意义. 本文采用从头算的多参考单双激发组态相互作用方法精确计算了 $[NHe]^{3+}$ 碰撞体系的分子结构参数, 包括势能曲线和耦合矩阵元等. 基于计算得到的结构参数, 采用全量子分子轨道强耦合方法开展了低能 N^{3+} 离子与 He 原子碰撞电荷转移过程研究, 获得了能量在 $3.16 \times 10^{-3} \text{ eV}$ — 24 keV (即 $2.25 \times 10^{-4} \text{ eV/u}$ — 1.73 keV/u) 范围内的总单电荷、双电荷转移截面和态选择截面. 在计算中考虑了电荷平动因子、高角动量态对碰撞过程的影响, 发现高角动量态对电荷转移截面具有显著影响. 与现有实验和理论结果相比, 当前计算的单电荷和双电荷转移截面与实验测量值更为接近. 相较于 Liu 等 (2011 *Phys. Rev. A* **84** 042706) 未考虑高角动量态的研究, 当碰撞能量大于 10 eV/u 时, 其总单电荷转移截面约高出当前计算值 2—3 倍, 表明高角动量态对电荷转移过程具有显著影响. 同时研究表明单电荷转移截面远大于双电荷转移截面, 在碰撞电荷转移过程中占据主导地位. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00165> 中访问获取.

关键词: 电荷转移, 散射截面, 高角动量态**PACS:** 25.40.Kv, 25.45.Kk, 25.55.Kr, 13.85.Lg**DOI:** 10.7498/aps.74.20250581**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250581

1 引言

高电荷态离子与原子碰撞过程广泛存在于天体物理和实验室等离子体环境中^[1–5], 碰撞过程中会产生大量的激发态, 涉及复杂的多体关联问题. 碰撞反应的散射截面和速率系数等信息是揭示星际空间的物质分布和演化特性的重要参数. 在天文环境中, 电荷转移过程对低温低密度星际介质中各

种离子电离度分布具有重要影响. H, He 是星际空间中最丰富的中性粒子^[6]. 在实验室等离子体环境中, N 是磁约束聚变反应器中的主要轻杂质之一, He 是聚变反应的主要产物, 两者在等离子体的不同电离阶段以不同的相对能量出现^[7]. He 也是自然界中最简单的多电子原子^[8]. 因此, N^{3+} 离子与 He 原子的碰撞过程研究, 不仅对星际空间化学网络的建模、星际介质演化分布分析具有重要意义, 还可以为托卡马克等离子体的模拟与诊断提供关

* 国家自然科学基金 (批准号: 12203106, 12204288) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: wangy@tyust.edu.cn

键的理论支持.

目前对于 N^{3+} 离子与 He 原子碰撞过程, Kamber 等^[9] 在实验方面使用高分辨率平移能量增益谱测量了碰撞能量为 6, 9, 12 和 15 keV 时的 H_2 , He, Ne, Ar 与 N^{3+} 离子碰撞的单电子捕获截面, 在理论方面基于 LZ(Landau-Zener) 方法、AS(absorbing sphere) 模型、MS(Müller-Salzborn) 标度定律和经典过垒模型 (COB) 计算了在这 4 种能量下的单电子捕获截面. 但是, 他们的实验结果和理论结果之间存在很大差异, 理论结果将总截面高估了至少 3 倍. 2004 年, Ishii 等^[10] 在实验方面采用微型电子束离子源装置和八极离子束导向器, 测量了入射能量为 (1.0—1800) q eV 时, C^{q+} , N^{q+} 和 O^{q+} ($q = 2-6$) 离子与 He 碰撞的单电子和双电子捕获 (DEC) 截面. 在理论方面, 他们利用 COB 和多通道 LZ 模型对该碰撞过程进行模拟, 但是理论结果与实验结果依然存在很大的差异. 1979 年, Gardner 等^[11] 利用标准束气靶法测量了能量为 242 keV 时, N^{3+} 离子与 He 碰撞电荷转移截面. 2011 年, Liu 等^[7] 采用全量子分子轨道强耦合 (QMOCC) 方法, 考虑 18 个反应通道 (包含 10 个 $^1\Sigma$ 态和 8 个 $^1\Pi$ 态, 忽略了高角动量 $^1\Delta$ 态和三重态的影响), 对低能区的 N^{3+} 离子与 He 原子碰撞单-双电荷转移截面进行了研究. 在能量重叠区域, 双电子捕获截面与实验符合得很好, 但是单电子捕获截面依然存在较大差距, 约是实验值的 2—3 倍. 2019 年 Xu 等^[12] 采用冷靶反冲离子动量谱开展了 N^{3+} 离子与 He 原子碰撞的单电荷转移过程的研究. 研究表明当碰撞能量为 30 keV 时, 基态 $N^{3+}(1s^2)$ 离子与 He 原子碰撞时, 电荷转移形成 $N^{2+}(2s^2 2p^2 P)$ 态占据主导地位. 2024 年, Lin 等^[13] 采用光学势和半经典方法进一步研究了 N^{3+} 与 He 碰撞的低能区特性, 计算了辐射衰变截面, 发现其值较小 (小于 $4 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$), 为理解该碰撞体系的次要过程提供了补充.

本文采用从头算的多参考单双激发组态相互作用 (MRD-CI) 方法^[14-17] 精确计算 $[N\text{He}]^{3+}$ 碰撞体系的分子结构参数, 包括势能曲线、径向耦合矩阵元以及转动耦合矩阵元等. 基于计算得到的高精度结构参数, 采用 QMOCC 方法^[17-20] 开展了低能区 N^{3+} 离子与 He 原子碰撞单、双电荷转移过程的理论研究. 在计算过程中考虑了高角动量 $^1\Delta$ 态的影响, 获得了能量范围在 $2.25 \times 10^{-4} \text{ eV/u}$ — 1.73 keV/u 的总的单、双电荷转移截面和态选择截面.

2 理论方法

2.1 全量子分子轨道强耦合方法 (QMOCC)

QMOCC 方法^[17-20] 可以有效地处理重粒子碰撞过程中的电子-电子关联及电子-核关联效应, 是目前处理低能区重粒子碰撞过程最准确的方法. 该方法在质心坐标系下, 基于玻恩-奥本海默近似, 将体系的总波函数展开为核绝热波函数 $F_i(\mathbf{R})$ 与电子绝热波函数 $\psi_i(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ 的乘积:

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_i F_i(\mathbf{R}) \psi_i(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (1)$$

式中, $\mathbf{R}$ 和 $\mathbf{r}$ 分别表示为分子核间距和电子的坐标, ψ_i 对应通道态. 则薛定谔方程可写为

$$[\nabla_{\mathbf{R}}^2 \mathbf{I} - 2\mu(\mathbf{u} - E\mathbf{I})]F(\mathbf{R}) = (\mathbf{M}(\mathbf{R}) + \mathbf{P}(\mathbf{R}) \cdot \nabla_{\mathbf{R}})F(\mathbf{R}), \quad (2)$$

式中, μ 表示约化质量; $\mathbf{u}$ 为对角的绝热势矩阵, $u_{ij} = \varepsilon_j \delta_{ij}$, ε_j 是绝热态的本征能量; E 为碰撞能量; $\mathbf{I}$, $\mathbf{M}$, $\mathbf{P}$ 分别表示单位矩阵和耦合矩阵. 对 $F(\mathbf{R})$ 进行分波展开, 再将 (1) 式代入 (2) 中, 可得

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - \lambda^2}{R^2} - 2\mu(u(R) - E) \right] f^J(R) = (V^R(R) + V^C(R))f^J(R), \quad (3)$$

式中, λ 是对角矩阵, J 为总角动量; V^R 和 V^C 分别表示为径向耦合矩阵和转动耦合矩阵, 具体形式如下:

$$V_{ij}^R(R) = \left[\langle i | -\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{L_x^2 + L_y^2}{R^2} | j \rangle - 2 \langle i | \frac{\partial}{\partial R} | j \rangle \frac{\partial}{\partial R} \right] \delta_{\lambda_i \lambda_j}, \quad (4)$$

$$V_{ij}^C(R) = -2\delta_{\lambda_i, \lambda_j+1} [(J - \lambda_i)(J + \lambda_i + 1)]^{1/2} \frac{\langle i | iL_y | j \rangle}{R^2}, \quad (5)$$

其中, i, j 为波函数 ψ_i 和 ψ_j 的简写, 且 $\langle \psi_i | L_z^2 | \psi_j \rangle = \lambda_j^2 \delta_{ij}$; L_x , L_y , L_z 分别表示角动量在 x , y , z 方向的分量; λ_i 是对角矩阵元. 为了计算方便, 将势矩阵和耦合矩阵元变换到非绝热表象上. 令 $f^J = Cg^J$, f 与 g 分别为耦合方程的解, C 为正交变换矩阵.

当 $\lim R \rightarrow \infty, C(R) \rightarrow \mathbf{I}$ 且 $\frac{dC}{dR} + AC = 0$. 则非绝热表象下径向耦合方程 (3) 式可表示为

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - \lambda^2}{R^2} + 2\mu E \right] g_\gamma^J - 2\mu \sum_{\gamma'} U_{\gamma, \gamma'}(R) g_{\gamma'}^J = 0, \quad (6)$$

$$U_{\gamma, \gamma'}(R) \equiv [C(u - P)C^{-1}]_{\gamma, \gamma'}, \quad (7)$$

式中, u 和 U 分别表示对角的绝热势与非绝热势矩阵, P 为转动耦合矩阵元. (6) 式满足如下边界条件:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} g_\gamma^J(R) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{k_\gamma}} [\delta_{\gamma, \gamma'} j_J(k_\gamma R) + K_{\gamma, \gamma'}^J \gamma \eta_J(k_\gamma R)],$$

$$k_\gamma = \sqrt{2\mu[E - \varepsilon_\gamma(\infty)]}, \quad (8)$$

其中 j_J 和 η_J 分别为规则和非规则的 Bessel-Ricatti 函数解, 与平面波的边界条件匹配, 或者对于库仑通道, 指规则和非规则 Coulomb 函数解. 采用 Johnson 的对数求导方法求解 (6) 式即可得到 K 矩阵, 进而获得碰撞散射 S 矩阵:

$$S_J = [I + iK_J]^{-1} [I - iK_J], \quad (9)$$

则从一个通道 i 到另一个通道 j 的非弹性散射截面为

$$\sigma_{(i \rightarrow j)} = \frac{\pi}{k_i^2} \sum_J (2J+1) |S_J|_{i,j}^2. \quad (10)$$

其中 k_i 是质心运动的初始动量.

2.2 分子结构计算

本文采用 MRD-CI 方法^[14-16] 计算了 $[\text{NHe}]^{3+}$

体系的势能曲线、偶极跃迁矩阵元、径向耦合矩阵元和转动耦合矩阵元. 在计算过程中, 采用 aug-cc-pVQZ 型基组以及弥散基来描述 He 原子与 N 原子. 对于 N 原子, 基组由 (28s, 10p, 4d, 3f, 2g) 收缩到 (22s, 7p, 4d, 3f, 2g). 对于 He 原子, 基组由 (11s, 3p, 3d, 2f) 收缩到 (7s, 3p, 3d). 在组态相互作用计算中, 组态阈值选取为 10^{-8} hartree, 作为判断计算收敛的依据. 在参考组态选择中, 对 1A1 对称类取 368 个主组态, 对 1B1 对称类取 266 个主组态. 对主组态考虑电子的单-双激发, 共计算了 NHe^{3+} 分子离子 1A1 对称类的 11 个 $^1\Sigma$ 态和 4 个 $^1\Delta$ 分子态, 1B1 对称类的 10 个 $^1\Pi$ 态. 计算的分子核间距为 1.00—100.00 a.u. 表 1 列出了所有分子态在渐近区对应的原子态 (其中 $\text{N}^{3+}(1s^2 2s^2 \ ^1S) + \text{He}(1s^2)$ 为入射通道, 其他为出射通道) 以及各能级大小, 并与 NIST^[21] 实验原子能级进行比较, 可以发现理论计算误差均在 0.06 eV 之内, 满足散射计算对分子结构精确度的要求. 基于计算得到的电子波函数, 即可得到散射计算所需要的径向以及转动耦合矩阵元. 当碰撞能量大于 1 keV/u 时, 电荷平动因子 (ETF) 对碰撞过程有着非常最重要的影响, 需要对径向耦合矩阵元和转动耦合矩阵元进行修正^[22-26]:

$$\langle \psi_i | \partial/\partial R - (\varepsilon_i - \varepsilon_j) \mathbf{z}^2 / 2R | \psi_j \rangle,$$

$$\langle \psi_i | iL_y + (\varepsilon_i - \varepsilon_j) \mathbf{z}x | \psi_j \rangle, \quad (11)$$

式中, ε_i 和 ε_j 表示两个态的电子能级, $\mathbf{z}^2$ 与 $\mathbf{z}x$ 表示电四极矩.

表 1 NHe^{3+} 单重态渐近区各能级与 NIST 表^[21] 中结果的对比

Table 1. Compared the energy levels in the asymptotic region of the singlet state of NHe^{3+} with the results in NIST^[21].

渐近原子态	分子态	Energy/eV		
		MRD-CI	NIST ^[21]	Errors
$\text{N}^{2+}(2s^2 2p \ ^2P^o) + \text{He}^+(1s)$	$1^1\Sigma, 1^1\Pi$	0.0000	0.0000	0.0000
$\text{N}^{2+}(2s \ 2p^2 \ ^2D) + \text{He}^+(1s)$	$2^1\Sigma, 1^1\Delta, 2^1\Pi$	12.5087	12.5254	0.0167
$\text{N}^{2+}(2s 2p^2 \ ^2P) + \text{He}^+(1s)$	$3^1\Pi$	18.0958	18.0863	0.0095
$\text{N}^{2+}(2s 2p^2 \ ^2S) + \text{He}^+(1s)$	$3^1\Sigma$	16.2564	16.2425	0.0139
$\text{N}^{3+}(2s^2 \ ^1S) + \text{He}(1s^2)$	$4^1\Sigma$	22.8803	22.8579	0.0224
$\text{N}^{2+}((2p^3 \ ^2D^o) + \text{He}^+(1s)$	$4^1\Pi, 2^1\Delta$	25.1239	25.1780	0.0541
$\text{N}^+(2s^2 2p^2 \ ^1D) + \text{He}^{2+}$	$5^1\Sigma, 5^1\Pi, 3^1\Delta$	26.7503	26.7150	0.0353
$\text{N}^{2+}(2s^2 3s \ ^2S) + \text{He}^+(1s)$	$6^1\Sigma$	27.4341	37.4380	0.0039
$\text{N}^{2+}(2p^3 \ ^2P^o) + \text{He}^+(1s)$	$7^1\Sigma, 6^1\Pi$	28.5454	28.5665	0.0211
$\text{N}^+(2s^2 2p^2 \ ^1S) + \text{He}^{2+}$	$8^1\Sigma$	28.9204	28.8690	0.0514
$\text{N}^{2+}(2s^2 3p \ ^2P^o) + \text{He}^+(1s)$	$9^1\Sigma, 7^1\Pi$	30.4405	30.4586	0.0181
$\text{N}^{2+}(2s^2 3d \ ^2D) + \text{He}^+(1s)$	$10^1\Sigma, 8^1\Pi, 4^1\Delta$	33.1233	33.1333	0.0100
$\text{N}^{2+}(2s 2p 3s \ ^2P^o) + \text{He}^+(1s)$	$11^1\Sigma, 9^1\Pi$	36.8428	36.8421	0.0007
$\text{N}^{2+}(2s 2p 3p \ ^2P) + \text{He}^+(1s)$	$10^1\Pi$	38.2795	38.3274	0.0479

3 结果与讨论

3.1 分子结构

基于 MRD-CI 方法精确计算了 NHe^{3+} 分子离子的势能曲线、径向耦合矩阵元和转动耦合矩阵元等. 图 1 所示为 NHe^{3+} 碰撞体系分子核间距 $R = 1.00\text{--}50.00$ a.u. 之间的单重态绝热势能曲线, 图中实线表示 $^1\Sigma$ 态, 长虚线表示 $^1\Pi$ 态, 虚线表示 $^1\Delta$ 态. 其中 $4^1\Sigma$ 态为初始通道, 其他通道为出射通道. 可以看出当 $R = 5.22$ a.u. 和 8.08 a.u. 时, $4^1\Sigma$ 态与 $3^1\Sigma$ 态、 $3^1\Sigma$ 态与 $2^1\Sigma$ 态之间存在明显的可避免交叉点. 在这些抗交叉区域, 发生电荷转移的概率非常大. 利用有限差分方法计算得到了具有相同对称性的所有态之间的径向耦合矩阵元. 图 2—图 4 分别给出了 Σ 态、 Π 态、 Δ 态相邻两通道之间的径向耦合矩阵元, 这决定了具有相同自旋和相同角动量 λ 的态之间的转移概率. 从图 2—图 4 可以

清楚地观察到, 各径向耦合矩阵元的极值位置都与图 1 中相应的绝热势能曲线之间的抗交叉点的位置一一对应. 在渐近区径向耦合矩阵元的大小趋近于零. 图 5 所示为 Σ 态与 Π 态、 Δ 态与 Π 态之间部分重要转动耦合矩阵元. 这些矩阵元都已经将 ETF 效应考虑在内, 决定了具有相同自旋但角动量 λ 相差 1 的态之间的转移概率. 从图 5 可以发现, 当 $R < 10.00$ a.u. 时, 转动耦合矩阵元存在一些比较明显的结构. 在 QMOCC 计算中, 转动耦合矩阵元需要除以 R^2 , 因此在渐进区转动耦合矩阵元也会逐渐趋近于零.

3.2 散射截面

基于 QMOCC 方法, 开展了碰撞能量范围在 3.16×10^{-3} eV—24 keV (即 2.25×10^{-4} eV/u—1.73 keV/u) 之间的 N^{3+} 离子与基态 He 原子碰撞非辐射电荷转移过程的研究. 在计算过程中考虑了 10 个 $^1\Sigma$ 态、8 个 $^1\Pi$ 态, 特别包含了 4 个高角动量

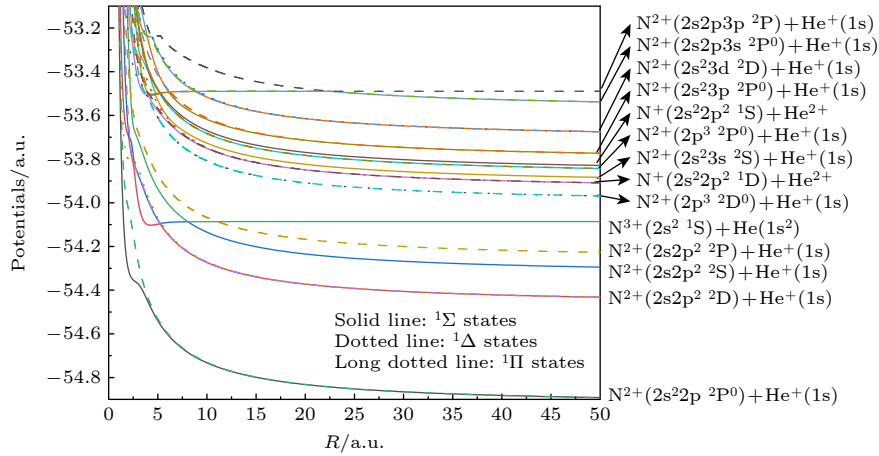


图 1 NHe^{3+} 碰撞体系单重态的绝热势能曲线

Fig. 1. Adiabatic potential curves of the singlet of NHe^{3+} collision system.

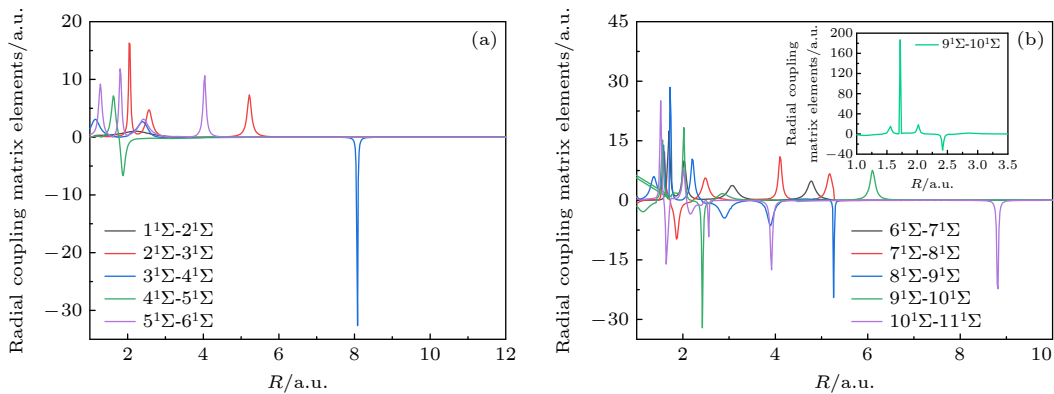


图 2 NHe^{3+} 碰撞体系单重态相邻两 $^1\Sigma$ 态间的径向耦合矩阵元

Fig. 2. Radial coupling matrix elements between the adjacent $^1\Sigma$ states for NHe^{3+} collision system.

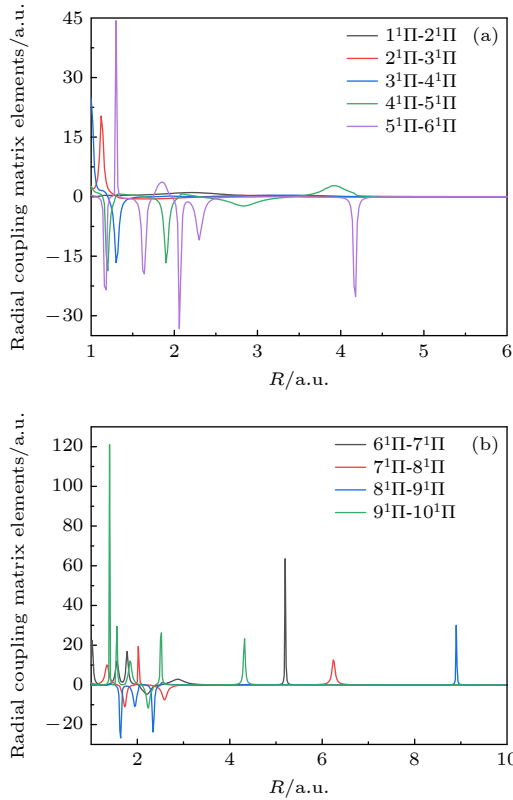


图 3 NHe³⁺碰撞体系单重态相邻两¹Π态间的径向耦合矩阵元

Fig. 3. Radial coupling matrix elements between the adjacent ¹Π states for NHe³⁺ collision system.

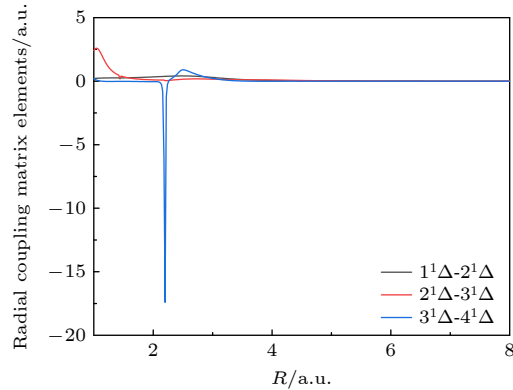


图 4 NHe³⁺碰撞体系单重态相邻两¹Δ态间的径向耦合矩阵元

Fig. 4. Radial coupling matrix elements between the adjacent ¹Δ states for NHe³⁺ collision system.

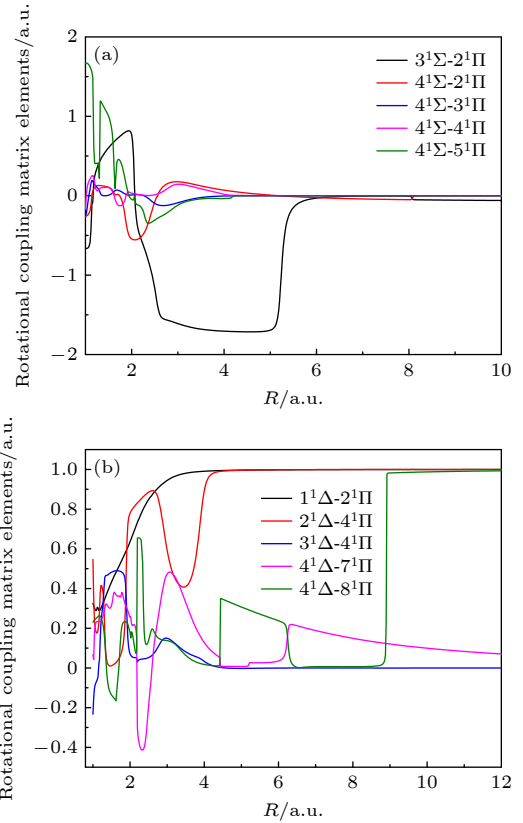


图 5 NHe³⁺碰撞体系单重态部分重要的转动耦合矩阵元

Fig. 5. Some important singlet rotational coupling matrix elements for NHe³⁺ collision system.

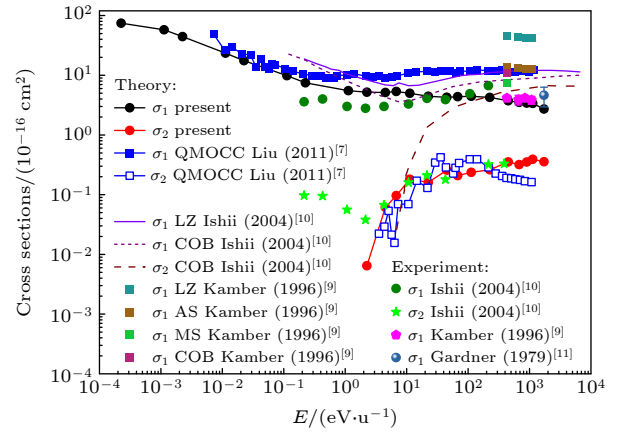


图 6 N³⁺离子与基态 He 原子碰撞总的单、双电荷转移截面

Fig. 6. Total single and double charge transfer cross sections in N³⁺-He collisions.

¹Δ 态, 得到了总的单电荷转移截面、总的双电荷转移截面和态选择截面. 图 6 所示为基于 QMOCC 方法计算得到的碰撞能量在 2.25×10^{-4} eV/u—1.73 keV/u 之间的总的单电荷转移截面和总的双电荷转移截面与其他理论 (Liu 等^[7] 采用 QMOCC 方法计算得到的结果, Ishii 等^[10] 采用 LZ, COB

法计算得到的结果, Kamber 等^[9] 采用 LZ, AS, MS, COB 方法计算得到的理论结果) 和实验测量值 (Ishii 等^[10]、Kamber 等^[9] 以及 Gardner 等^[11] 的实验测量值) 之间的对比. 图中 σ_1 表示总的单电荷转移截面, σ_2 表示总的双电荷转移截面. 从图 6 可以看出, 总的单电荷转移截面要比总的双电荷转移截

面大得多,所以在碰撞电荷转移过程中,单电荷转移过程占据主导地位.随着能量的增大,总的单电荷转移截面逐渐降低,总的双电荷转移截面逐渐增大.在能量重叠区域,对于总的双电荷转移截面,本文计算结果与 Ishii 等^[10]的实验值符合得很好.对于总的单电荷转移截面,当碰撞能量小于 0.2 eV/u 时,本文计算结果与 Liu 等^[7]采用 QMOCC 方法计算得到的结果符合得很好.当碰撞能量在 0.2—22 eV/u 时,本文计算结果与其他理论结果相比更接近实验值,比 Ishii 等^[10]的实验结果略高但趋势保持一致.当碰撞能量在 22 eV/u—1.73 keV/u 时,本文计算结果与 Ishii 等^[10]、Kamber 等^[9]以及 Gardner 等^[11]的实验测量结果在误差范围内符合得很好.需要说明的是,本工作和 Liu 等^[7]虽然都采用 QMOCC 方法来计算电荷转移截面,但是 Liu 等^[7]在计算过程中只考虑了 10 个 $^1\Sigma$ 态和 8 个 $^1\Pi$ 态,忽略了 $^1\Delta$ 态的作用,其计算结果高于 Ishii 等^[10]、Kamber 等^[9]的实验测量值,约是实验值的 2—3 倍.而我们在计算过程中考虑这些态的同时还考虑了高角动量态 $^1\Delta$ 态的作用,并且对于基组进行优化,因此计算结果更接近实验值.尤其在能量大于 22 eV/u 时,本文计算结果与现有实验值符合得很好.可以发现高角动量态对电荷转移截面的影响显著.

图 7 所示为 N^{3+} 离子与基态 He 原子碰撞电荷转移形成 N^+ 离子的双电荷转移态选择截面.对于双电荷转移过程来说,随着能量的增大,电荷转移形成 $N^+(2s^22p^2\ ^1D)$ 占据主导地位.图 7 还显示了本文 QMOCC 理论计算结果与 Liu 等^[7]的 QMOCC

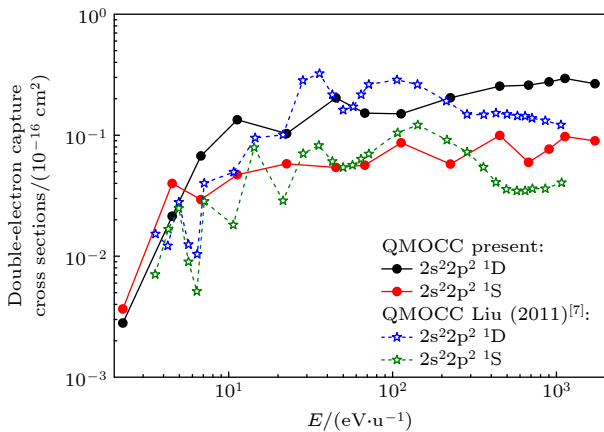


图 7 N^{3+} 离子与基态 He 原子碰撞电荷转移形成 N^+ 离子的态选择截面

Fig. 7. State selective cross sections for charge transfer to N^+ ion in N^{3+} -He collisions.

的理论计算结果.可以发现,本文计算结果与 Liu 等^[7]的计算结果存在明显差异,这种差异在低能区 ($E < 57$ eV/u),没有反映到总的双电荷转移截面上,但是当碰撞能量高于 57 eV/u 时,对总的双电荷转移截面有明显的影 响.这种差异存在的原因主要来源于计算过程中对组态优化的不同和考虑高角动量态的影响.

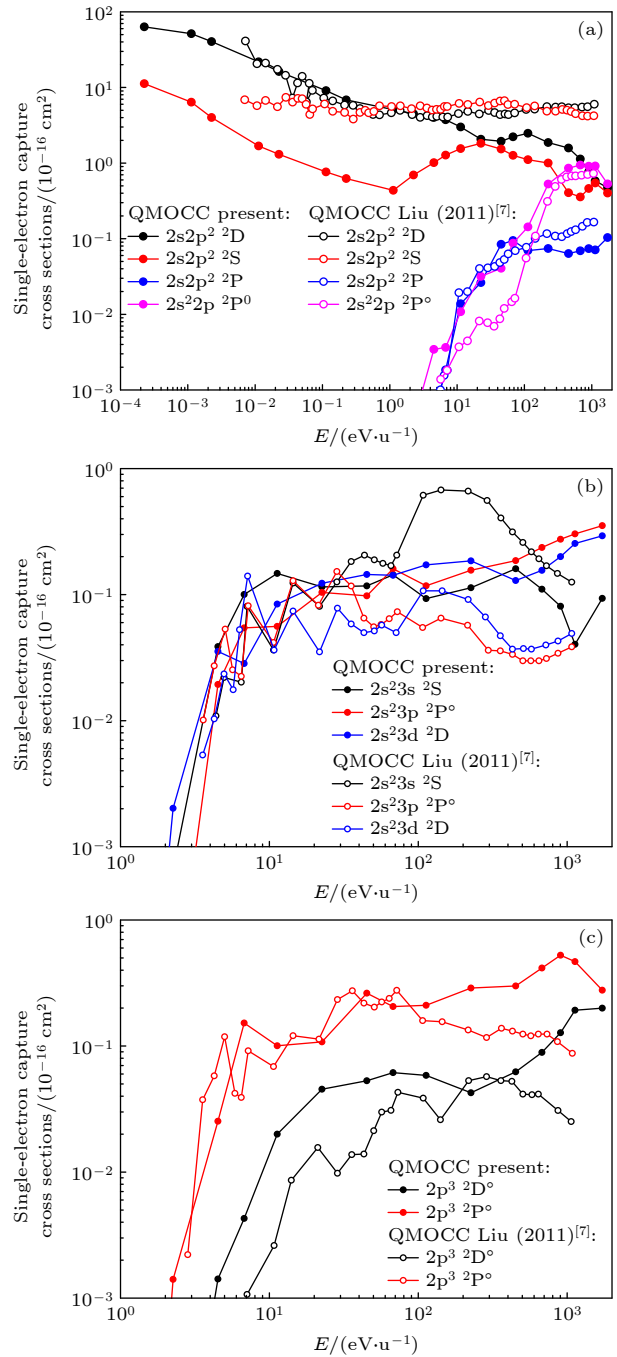


图 8 N^{3+} 离子与基态 He 原子碰撞电荷转移形成 N^{2+} 离子的态选择截面

Fig. 8. State selective cross sections for charge transfer to N^{2+} ion in N^{3+} -He collisions.

图 8 为 N^{3+} 离子与基态 He 原子碰撞电荷转移形成 N^{2+} 离子的单电荷转移态选择截面. 当碰撞能量低于 677 eV/u 时, 电荷转移形成 $N^{2+}(2s2p^2\ ^2D)$ 占据主导地位. 当碰撞能量为 677 eV/u—1.73 keV/u 时, 电荷转移形成 $N^{2+}(2s^22p\ ^2P^\circ)$ 占据主导地位. 还可以发现, 对于电荷转移形成 $N^{2+}(2s2p^2\ ^2D)$ 的散射截面, 当能量低于 7 eV/u 时, 本文计算结果与 Liu 等^[7]的计算结果符合得很好, 当能量高于 7 eV/u 时, 本文计算结果小于 Liu 等^[7]的计算结果. 对于电荷转移形成 $N^{2+}(2s2p^2\ ^2S)$ 的散射截面, 本文计算结果明显小于 Liu 等^[7]的计算结果. 对于电荷转移形成其他态的单电荷转移截面, 本文计算结果与 Liu 等^[7]的计算结果也存在一定的差异, 所以高角动量态对碰撞电荷转移过程具有重要的影响.

4 结 论

本文基于 QMOCC 方法开展了低能区 N^{3+} 离子与基态 He 原子碰撞单、双电荷转移过程研究. 采用 MRD-CI 量化程序包计算得到了 $[NHe]^{3+}$ 碰撞体系的势能曲线、径向耦合矩阵元和转动耦合矩阵元. MRD-CI 方法集合了 HF-SCF 计算和 MRCI 计算的功能, 可以有效地处理电子关联问题, 获得高精度的分子离子激发态. 对于径向和转动耦合矩阵元, 对其进行 ETF 因子修正. 在当前的 QMOCC 计算中, 考虑 10 个 $^1\Sigma$ 态、8 个 $^1\Pi$ 态和 4 个 $^1\Delta$ 态, 得到了能量范围在 2.25×10^{-4} eV/u—1.73 keV/u 的总的单、双电荷转移截面和态选择截面. 计算结果与现有理论和实验结果进行比较, 可以发现对于总的双电荷转移截面, 我们计算值与实验值符合得很好. 对于总的单电荷转移截面, 当碰撞能量为 0.2—11 eV/u 时, 当前的 QMOCC 结果略高于实验结果. 当碰撞能量高于 11 eV/u 时, 当前的 QMOCC 结果与实验结果符合得很好. 总的单电荷转移截面明显大于总的双电荷转移截面, 并占据主导地位. 对于单电荷转移过程, 可以发现电荷转移形成 $N^{2+}(2s2p^2\ ^2D)$ 和 $N^{2+}(2s^22p\ ^2P^\circ)$ 至关重要. 当前的 QMOCC 计算结果与 Liu 等^[7]的计算结果相比较, 可以发现存在明显的差异, 所以高角动量态对电荷转移过程有着非常重要的影响. 后续将进一步开展 ETF 因子、多通道耦合效应、高角动量态对高离化度离子与原子碰撞过程的影响.

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.j00213.00165> 中访问获取.

参考文献

- [1] Zhu Y H, Yuan X, Wu Y, Wang J G 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 163401 (in Chinese) [朱宇豪, 袁翔, 吴勇, 王建国 2023 物理学报 **72** 163401]
- [2] Liu C H 2009 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: University of the Chinese Academy of Sciences) (in Chinese) [刘春华 2009 博士学位论文 (北京: 中国科学院大学)]
- [3] Gao Z M, Chen X M, Liu Z Y, Ding B W, Lu Y X, Fu H B, Liu Y W, Du J, Cui Y, Shao J X, Zhang H Q, Sun G Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2079 (in Chinese) [高志民, 陈熙萌, 刘兆远, 丁宝卫, 鲁彦霞, 付宏斌, 刘玉文, 杜娟, 崔莹, 邵剑雄, 张红强, 孙光智 2007 物理学报 **56** 2079]
- [4] Lin X H 2019 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Beijing Institute of Technology) (in Chinese) [林晓贺 2019 博士学位论文 (北京: 北京理工大学)]
- [5] Rice J E, Marmar E S, Terry J L, Källne E, Källne J 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 50
- [6] Steigman G 1975 *Astrophys. J.* **199** 642
- [7] Liu X J, Wang J G, Qu Y Z, Buenker R J 2011 *Phys. Rev. A* **84** 042706
- [8] Mondal M, Mandal B, Mistry T, Jana D, Purkait M 2024 *Chin. Phys. B* **33** 113401
- [9] Kamber E Y, Akgüngör K, Leather C, Brenton A G 1996 *Phys. Rev. A* **54** 1452
- [10] Ishii K, Itoh A, Okuno K 2004 *Phys. Rev. A* **70** 042716
- [11] Gardner L D, Bayfield J E, Koch P M, et al. 1979 *Phys. Rev. A* **20** 766
- [12] Xu J W, Zhu X L, Feng W T, et al. 2019 *X-Ray Spectrometry* **49** 85
- [13] Lin M J, Li R, Lin X H, Ren X H 2024 *IEEE Academic International Symposium on Optoelectronics and Microelectronics Technology (AISOMT)* Harbin, China, November 21–22, 2024 p139
- [14] Buenker R J, Liebermann H P, Izgorodina E I 2003 *Chem. Phys.* **291** 115
- [15] Buenker R J, Peyerimhoff S D 1974 *Theoret. Chim. Acta* **35** 33
- [16] Krebs S, Buenker R J 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 5613
- [17] Wu Y, Liu L, Wang J G 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 947 (in Chinese) [吴勇, 刘玲, 王建国 2008 物理学报 **57** 947]
- [18] Nolte J L, Stancil P C, Liebermann H P, Buenker R J, Hui Y, Schultz D R 2012 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 245202
- [19] Zygelman B, Cooper D L, Ford M J, Dalgarno A, Gerratt J, Raimondi M 1992 *Phys. Rev. A* **46** 3846
- [20] Wu Y, Stancil P C, Liebermann H P, et al. 2011 *Phys. Rev. A* **84** 022711
- [21] Kramida, A, Ralchenko Y, Reader J, NIST ASD Team 2024 *NIST Atomic Spectra Database (Ver. 5.12)* [2025-4-29]
- [22] Errea L F, Mendez L, Riera A 1982 *J. Phys. B* **15** 101
- [23] Bacchus M C, Ceyzeriat P 1998 *Phys. Rev. A* **58** 1162
- [24] Errea L F, Harel C, Jouini H, et al. 1994 *J. Phys. B* **27** 3603
- [25] Wang K, Dong C, Qu Y Z, et al. 2023 *Chin. Phys. B* **32** 083103
- [26] Wang K, Wang X X, Qu Y Z, Liu C H, Liu L, Wu Y, Buenker R J 2020 *Chin. Phys. Lett.* **37** 023401

SPECIAL TOPIC—Atomic, molecular and materials properties data

Charge transfer cross sections of collisions of N^{3+} ions with He atoms in low energy region^{*}

LIN Xiaohe^{1) #} LIN Minjuan^{2) #} WANG Kun⁵⁾ WU Yong³⁾REN Yuan¹⁾ WANG Yu^{4) †} LI Jiewei⁶⁾¹⁾ (*Space Engineering University, Beijing 101416, China*)²⁾ (*College of Science, College of Science, Qiqihar University, Qiqihar 161006, China*)³⁾ (*National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)⁴⁾ (*School of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China*)⁵⁾ (*Institute of Environmental Science, Shanxi University, Taiyuan 030006, China*)⁶⁾ (*Chongqing Polytechnic Institute, Chongqing 410320, China*)

(Received 30 April 2025; revised manuscript received 30 May 2025)

Abstract

The collision process between N^{3+} ions and He atoms is of great significance in astrophysics, interstellar space and laboratory plasma environment. The single- and double-charge transfer processes for the collisions of N^{3+} with He atoms are studied by using the quantum-mechanical molecular-orbital close-coupling (QMOCC) method. The *ab initio* multireference single- and double-excitation configuration interaction (MRD-CI) methods are employed to obtain the adiabatic potentials and the radial and rotational coupling matrix elements that are required in the QMOCC calculation. In the present QMOCC calculations, 10 $^1\Sigma$ states, 8 $^1\Pi$ states and 4 $^1\Delta$ states are considered, and total single- and double-charge transfer cross sections and state selection cross sections are calculated in an energy region from 3.16×10^{-3} eV–24 keV (i.e., 2.25×10^{-4} eV/u–1.73 keV/u). Comparison of our results with the previous theoretical and experimental results shows that our results agree well with the experimental values for the total double-charge transfer (DCT) cross sections. For the total single-charge transfer (SCT) cross sections, our QMOCC results are slightly higher than the experimental results in an energy region of 0.2–11 eV/u. When the energy is higher than 11 eV/u, the present QMOCC results are in good agreement with the experimental results. The total SCT cross section is significantly larger than the total DCT cross section, so SCT process is a dominant reaction process. For the SCT process, it can be observed that the charge transfer to $\text{N}^{2+}(2s2p^2\ ^2D)$ and $\text{N}^{2+}(2s2p^2\ ^2P^\circ)$ is very important. It should be noted that although we and Liu et al. (*Phys. Rev. A* 2011 **84** 042706) both used the QMOCC method to study the charge transfer cross section, our calculation results are still significantly different from their calculation results. It is due to the fact that Liu et al.'s calculations only considered 10 $^1\Sigma$ states and 8 $^1\Pi$ states, and ignored the effect of $^1\Delta$ states.

The datasets presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00165>.

Keywords: charge transfer, cross sections, high angular momentum states

PACS: 25.40.Kv, 25.45.Kk, 25.55.Kr, 13.85.Lg

DOI: 10.7498/aps.74.20250581

CSTR: 32037.14.aps.74.20250581

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12203106, 12204288).

[#] These authors contributed equally.

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

低能区 N^{3+} 离子与He原子碰撞电荷转移截面研究

林晓贺 林敏娟 王堃 吴勇 任元 王瑜 李婕维

Charge transfer cross sections of collisions of N^{3+} ions with He atoms in low energy region

LIN Xiaohe LIN Minjuan WANG Kun WU Yong REN Yuan WANG Yu LI Jiewei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 152501 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250581

CSTR: 32037.14.aps.74.20250581

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250581>

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>

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>

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Ar⁸⁺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 Ar⁸⁺ with He

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

离子的低能电子弹性散射研究: 共振态与同分异构

Low-energy electron elastic scattering of anions: Resonance states and conformers

物理学报. 2024, 73(24): 243401 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241377>

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>