

文章编号: 1007-4627(2025)02-0328-09

低能高电荷态离子与 H 原子电荷交换 X 射线发射及天文应用

张驰军^{1,2}, 廖添³, 张瑞田^{1,2,†}, 朱小龙^{1,2}, 郭大龙^{1,2}, 高永^{1,2}, 许慎跃^{1,2}, 张少锋^{1,2}, 马新文^{1,2,†}

(1. 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000;
3. 中山大学中法核工程学院, 广东 珠海 519082;
2. 中国科学院大学, 北京 100049)

摘要: 低能高电荷态离子与 H 原子电荷交换 X 射线的实验和理论研究为天体环境中非平衡态等离子体的诊断和建模提供了重要原子数据。本工作利用半经典多通道 Landau-Zener (MCLZ) 方法计算了全裸和类氢的 C、N、O 离子与 H 原子电荷交换截面并与已报道实验结果进行了比较。我们发现, 对于 $C^{5+} + H$ 碰撞体系, 理论计算的总截面和实验测量相差较大。同时, 也对比了太阳风离子速度(或能量)区间 MCLZ 方法和全量子分子轨道紧耦合(QMOCC)方法计算的态选择截面。发现, 对于俘获到 $n=3$ 壳层, MCLZ 方法计算的态选择截面随碰撞能量升高而增加; 对于俘获到 $n=4$ 壳层, MCLZ 方法计算的态选择截面随碰撞能量升高而减小; 在低能端比 QMOCC 方法计算的截面小两个量级之多。最后, 采用天文领域发展的 Kronos 程序包, 通过 Janev 推荐的截面数据 [Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1999, 55(2):201] 计算了 $1 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$ $O^{8+} + H$ 电荷交换 X 射线谱、线强比及硬度比, 并与 MCLZ 计算结果比较。我们认为, MCLZ 计算方法结合 l 分布模型具有较大的不确定性, 会影响天体环境建模的准确性。亟需发展更加准确的全量子理论。

关键词: 低能高电荷态离子; 电荷交换; X 射线; 天体等离子体

中图分类号: O562.5

文献标志码: A

DOI: 10.11804/NuclPhysRev.42.2023063

CSTR: 32260.14.NuclPhysRev.42.2023063

0 引言

在低能高电荷态离子与中性原子/分子碰撞中, 靶原子/分子中的电子被炮弹离子俘获的过程被称为电荷交换、电子俘获或电荷转移。由于其非绝热量子态跃迁的本质, 靶电子容易被俘获到离子较高的激发态随后退激释放 X 射线。这一过程具体可用以下方程表示^[1-2]:

$$A^{q+} + B \rightarrow A^{(q-1)+}(nl) + B^+ \rightarrow A^{(q-1)+}(1s) + B^+ + \gamma, \quad (1)$$

其中: A^{q+} 、 B 、 γ 分别表示炮弹离子、靶原子/分子以及 X 射线光子; n 、 l 分别表示主量子数和角动量量子数; $1s$ 表示俘获后处于激发态的电子经过级联辐射退激到基态。从方程(1)可以看出, 该过程包含碰撞动力学和结构谱学两方面。根据动量和能量守恒, 电荷交换形成的反冲离子 B^+ 的纵向动量 $P_{\parallel}$ 、反应能 Q 关系如下:

$$P_{\parallel} = \frac{Q}{v_p} - \frac{1}{2} n_c m_e v_p, \quad (2)$$

其中: Q 为靶电子反应前后束缚能的变化; v_p 是炮弹离子速度; n_c 是俘获电子的数目。利用高分辨的冷靶反冲离子动量谱仪, 原子物理学家可以得到俘获电子的态选择相对截面和态布居信息。进而归一到总截面, 得到态选择绝对截面^[3]。谱学上, 俘获后处于激发态的炮弹离子自发辐射退激的过程会发射光子。测量辐射光子的能量及谱线强比, 考虑级联辐射模型^[4-5], 也可以推测离子种类和电荷交换的态布居信息。因此, 这一过程的研究不仅有助于人们理解微观世界多中心量子态跃迁机理, 而且在 X 射线天文观测、等离子体诊断、离子辐照材料表征等诸多宏观研究领域有着重要应用价值。以天文环境建模为例, 观测 X 射线发射谱可以用来鉴定天体环境等离子体的物理性质, 其离子种类、成分、温度等参数的解译依赖于地面实验室提供的对应天体物理过程的基准测量数据。例如, 恒星燃烧和超新星爆发等天体活动产生的高电荷态离子与星际间中性原子分子电荷交换过程具有很大反应截面, 该物理过程成为探测天

收稿日期: 2023-07-22; 修改日期: 2023-11-29

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2017YFA0402400215, 2017YFA0402300)

作者简介: 张驰军 (1997), 男, 甘肃兰州人, 博士研究生, 从事原子分子物理研究; E-mail: zhangchijun@impcas.ac.cn

† 通信作者: 张瑞田, E-mail: zhangrt@impcas.ac.cn; 马新文, E-mail: x.ma@impcas.ac.cn

体环境的一种天然探针。因而, 基于地面实验室的电荷交换实验数据能为此过程提供基准原子数据。

这里, 我们以电荷交换在X射线天文学领域的应用为例。1996年, Lisse等^[6]在彗星C/Hyakutake 1996 B2上首次观测到X射线谱。之后, ROSAT天文观测站又在另外五颗彗星上同样探测到X射线^[7], 这引起了天文学家的极大兴趣。2001年, Lisse等^[8]提出彗星C/Hyakutake观测到的软X射线极有可能是 C^{5+} 、 N^{7+} 、 O^{8+} 等太阳风离子和彗星气体相互作用导致的。2003年, Beiersdorfer等^[9]通过实验室模拟彗星软X射线发射, 证实了太阳风离子和彗星慧发中性原子分子电荷交换软X射线发射机制。Cravens等^[10]预言日光层25%~50%的软X射线是由于太阳风离子与星际间中性原子分子电荷交换导致的。在某些观测方向上几乎所有的软X射线发射都来自于电荷交换^[11]。随着天体观测以及高分辨软X射线探测技术的发展, 超新星爆炸碎片冲击波^[12]、太阳系外星系团^[13]以及恒星形成星系等天体环境中都已经观测到软X射线发射^[14]。这些炽热的高电荷态等离子流被喷发到星际空间时, 与中性气体碰撞发生电荷交换释放X射线, 成为宇宙弥散背景X射线的重要来源。

天文观测建模的需要给实验室天体物理研究提出了新的挑战。实验室模拟天体环境中电荷交换等离子体X射线谱成为一个新兴的研究领域。国际上开展此类研究的有美国喷气推进实验室Chutjian小组^[15]、劳伦斯利弗莫尔国家实验室Beiersdorfer小组^[9, 16]、橡树岭国家实验室Havener小组^[17]、德国马克普朗克研究所Crespo小组、荷兰格罗宁根Hoekstra小组^[18]。这些研究组大多集中在发展晶体谱仪或者量热器技术开展高分辨天体物理电荷交换相关软X射线测量, 通过实验室测量电荷交换X射线谱然后与天文观测拟合, 得出天体环境中高电荷态重离子速度以及离子成分信息。实验室天体物理研究另一个重要方面是结合大量电荷交换原子数据对天文观测的X射线谱进行建模, 目前发展的模型有ATOMDB^[19]、Plasma Code^[20]、XSPEC^[21]等。我国国内包括中国科学院近代物理研究所、复旦大学、国家天文台以及紫金山天文台等单位也逐渐开展这两方面的研究, 而且合作日趋紧密。

本文中, 我们将采用多通道Landau-Zener (MCLZ) 方法^[22]计算全裸和类氢的C、N、O离子与氢原子电荷交换截面并和已有实验截面数据进行比较。我们采用MCLZ方法计算 $C^{5+}+H$ 电荷交换态选择截面并和全量子的分子轨道紧耦合(QMOCC)^[23]方法计算的态选择截面数据进行比较, 以此来检验MCLZ方法的准确性。

在Kronos程序包^[24-25]基础上, 我们利用级联辐射模型计算 $O^{8+}+H$ 电荷交换X射线谱, 获得光子能量、谱线发射截面和线强比。另外, 我们在MCLZ方法上应用不同 l 分布函数得到 $O^{8+}+H$ 退激发射谱线的硬度比, 并与Janev推荐的截面数据计算的结果进行对比。该截面数据根据不同的碰撞能量选择适当的理论方法, 并通过发射谱线的实验截面对计算结果进行评估。当前, 由于裸离子和类氢离子电荷交换态选择截面实验数据的匮乏, 天文建模工作主要依赖于理论计算的态选择截面数据。在此情况下, 不同理论方法所得的光子能量分布、线强比及硬度比等关键参数直接决定了单一碰撞体系电荷交换X射线谱的谱形特征, 从而对天文建模的准确性和诊断结果的可靠性产生重要影响。本文采用天文建模中广泛应用的MCLZ方法, 系统计算太阳风离子的发射谱、线强比和硬度比等关键参数。通过对计算结果进行评估, 深入探讨MCLZ方法在天文建模应用中的准确性和适用性。

1 理论计算

Kronos程序包主要包括电荷交换截面数据以及级联辐射X射线谱计算两部分组成^[24-25]。电荷交换数据可由MCLZ、经典轨迹Monte-Carlo (CTMC)^[26]、原子轨道紧耦合(AOCC)^[27]、分子轨道紧耦合(MOCC)^[28]以及QMOCC等方法产生。其中, Kronos内建的电荷交换数据主要由MCLZ方法产生, 对于一些碰撞体系也包括AOCC和MOCC等量子力学方法计算的截面数据。根据这些态选择截面数据, 由级联辐射模型计算跃迁概率和分支比, 得到X射线发射谱。我们发展了多参数拟合Python程序, 该程序依托Kronos程序包批量快速获取电荷交换截面数据和X射线发射谱。我们将Kronos程序包输出结果汇总, 选择天体环境中适当的离子种类、碰撞能量和能量分辨等。再与天文观测X射线谱的实验数据拟合, 推测天体环境离子丰度信息, 具体见文献^[29]。

MCLZ方法是处理电荷交换问题的经典方法, 其计算迅速且与实验结果在量级和趋势上符合较好。因此, 我们在本文的计算都是基于该方法开展的。这里我们对MCLZ方法稍作介绍。电荷交换是一个多量子态布居问题, Landau-Zener理论中记 p_n 为碰撞体系在经过第 n 个可避免交叉点时仍留在 $A^{q+}+B$ 势能曲线上的概率。那么碰撞体系在该交叉点, 即炮弹和靶核的核间距与第 n 个可避免交叉点对应的核间距相等($R=R_n$)处, 发生跃迁的概率可以表示为^[30]

$$P_n = \left[1 + \sum_{j=0}^{N-n} \left((1 - p_{N+1-j}) \prod_{i=n+1}^{N-j} p_i \right)^2 \right] (1 - p_n) \prod_{i=1}^n p_i, \quad (3)$$

其中: N 是可避免交叉点的个数 $1 \leq n \leq N$, n 对应电子跃迁后的末态数量, 上式中如果跃迁概率 p_i 的序号大于 N , 则为零。Landau 和 Zener 各自独立推出了跃迁概率的表达式^[31-32]如下:

$$p_n = \exp\left(-\frac{2\pi H_{12}(R_n)^2}{v_{\text{rad}}(R_n)\Delta F(R_n)}\right), \quad (4)$$

其中: H_{12} 是描述初末态径向耦合强度的耦合矩阵元; v_{rad} 是径向速度; ΔF 是初末态势能曲线微分的差值的大小, 表达式为

$$\Delta F = \left| \frac{dH_{11}}{dR} - \frac{dH_{22}}{dR} \right|_{R=R_n}, \quad (5)$$

H_{11} 和 H_{22} 分别代表系统初末态哈密顿量。Landau-Zener 跃迁概率在交叉点处使用的条件是, 跃迁区域 $\delta R = |H_{12}/\Delta F|_{R=R_n}$ 的尺度要比两个相邻的可避免交叉点之间的间距小很多^[33]。上述变量都是指 $R = R_n$ 时的值^[33]。可避免交叉点的位置可以通过以下方法估计: 将入射通道的势能曲线设为常数(通常为 0), 同时将出射通道势能曲线近似为纯库仑势。即

$$R_n = \frac{q-1}{Q}, \quad (6)$$

式中 $q-1$ 指发生单俘获后炮弹离子的电荷态。

对于两态问题仅有一个交叉点, 随着入射离子接近靶原子, 两个原子核之间的间距逐渐减小。电子在入射和出射过程中两次经过可避免交叉点, 最终在交叉点发生俘获的概率为

$$P_n(b) = 2p_n(1 - p_n). \quad (7)$$

反应截面 σ_n 由跃迁概率 $P_n(b)$ 对碰撞参数 b 的积分得到:

$$\sigma_n = 2\pi \int_0^{R_n} P_n(b) b db. \quad (8)$$

利用 MCLZ 方法计算截面时, 必须考虑所有可能的俘获通道并计算可避免交叉点的位置。在这个过程中, 我们需要知道这些电子态精确的能级信息。对于电荷态较高的类氢离子, 如: Fe^{24+} , 其高主量子数 n 的能级信息往往是缺乏的。因此, 需要在里德堡公式的基础上进一步考虑量子数亏损^[25], 得到估计电子态能级的公式:

$$E_{nl} = E_0 \left(1 - \frac{1}{n^{*2}} \right), \quad (9)$$

其中: E_0 为电离势; n^* 为有效量子数, 由式 (10) 和 (11) 得到:

$$n^* = n - \mu_l, \quad (10)$$

$$\mu_l = l + \frac{1}{2} - \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \delta \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (11)$$

μ_l 称为量子数亏损, 通过式 (11) 计算得到, 由价电子轨道贯穿效应引起。在式 (11) 中, 从已知能级估计参数 δ 值的变化趋势, 再将其应用到高激发态离子得到电子态能级 E_{nl} 。

在使用 MCLZ 方法计算全裸炮弹离子的电荷交换截面时, 反应产物离子的角量子数 l 是简并的。Landau-Zener 理论要求可避免交叉点足够分离, 为获得 nl 分辨的态选择截面, 需要引入 l 分布模型。具体而言, 将 n 分辨的电荷交换截面乘以适当的 l 分布函数得到 nl 分辨的态选择截面。常用 l 分布的模型包括统计分布 (Stat)、低能分布 (Low)^[34]、优化的低能分布 (LowMod)^[35]、可分离分布 (Sep) 和 Landau-Zener 分布 (LZ)^[22] 等, 如下列公式所示:

$$W_{nl}^{\text{Stat}} = \frac{2l+1}{n^2}, \quad (12)$$

$$W_{nl}^{\text{Low}} = \frac{(2l+1)[(n-1)!]^2}{(n+l)!(n-l-1)!}, \quad (13)$$

$$W_{nl}^{\text{LowMod}} = l(l+1)(2l+1) \frac{(n-1)!(n-2)!}{(n+l)!(n-l-1)!}, \quad (14)$$

$$W_{nl}^{\text{Sep}} = \left(\frac{2l+1}{q_1} \right) \frac{(n-1)!(n-2)!}{(n+l)!(n-l-1)!}, \quad (15)$$

$$W_{nl}^{\text{LZ}} = \frac{l(l+1)(2l+1)(n-1)!(n-2)!}{(n+l)!(n-l-1)!}. \quad (16)$$

统计分布和低能分布是常用的两种分布类型, 根据 Krasnopolsky^[34] 的建议, 统计模型应用于离子能量超过 $10 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$, $l = n-1$ 的角量子数在俘获中占据主导。低能模型由 Abramov 等^[36] 提出, 应用于能量小于 $0.1 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$, 对于 $n < 8$ 的俘获 $l = 1$ 占据主导, l 随着 n 的增加逐渐增加。

电荷交换后电子通常被俘获到离子激发态, 其不稳定的特性导致电子很快通过级联辐射退激。级联辐射模型考虑所有偶极允许 $\Delta l = \pm 1$ 和 $\Delta S = 0$ 的跃迁通道并计算跃迁概率 $A_{n,l \rightarrow n',l'}$, 即爱因斯坦自发辐射系数。结合俘获后电子态布居和级联辐射所有可能的跃迁路径, 叠加跃迁的总概率, 可以得到谱线线强比。Lyman 系列谱

线为 $n \geq 2 \rightarrow n = 1$ 的跃迁, 能够直接反映高电荷态离子的种类信息。天体环境存在的高电荷态离子退激发射光子, Lyman 系列谱线能量主要处在 X 射线能区。借助 X 射线探测器或微量热器, 人们能够分辨这些谱线的来源。对于类氢炮弹离子的俘获过程, 处于激发态的类氢离子退激发产生 K 系列谱线。

2 结果讨论

为验证 MCLZ 方法计算电荷交换截面的可靠性, 我们对比了全裸和类氢的 C、N、O 离子与 H 原子总截面, 其中截面数据分别来自 MCLZ 理论计算和实验测量。由于氢原子是最简单的单电子体系, 其电荷交换过程仅涉及单电子俘获, 无需考虑多电子俘获等其他机制的贡献。另外, MCLZ 方法在处理单电子俘获问题上, 与实验结果符合较好, 而对多电子俘获过程需要考虑大量入射出射通道, 使得计算结果偏差较大。如图 1 所示, 电荷交换实验的总截面数据来自于文献 [37] 和 [38]。图

中红线表示 MCLZ 方法计算的总截面。

我们发现, 在计算能区范围内, $C^{5+} + H$ 的实验截面相比 MCLZ 方法计算截面较高。在 $C^{6+} + H$ 、 $N^{6+} + H$ 和 $O^{8+} + H$ 碰撞体系中, 低能区实验截面随碰撞能量降低出现下降, MCLZ 方法计算虽然预测了这种下降趋势但截面变化较为缓慢与实验结果背离。 $O^{7+} + H$ 体系低能区 MCLZ 预测的截面上升而实验截面基本不随能量变化。 $N^{7+} + H$ 体系的实验截面与理论计算截面符合较好。

对于太阳风离子, 其典型能区在 $200 \sim 800 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ 之间 [39–40], 小于 $400 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ 被称作慢太阳风, 大于 $800 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ 为快太阳风。超过 $750 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ 的部分可能来自于高纬度太阳冕洞, 在彗星和行星的弓形激波中下降到慢太阳风以下 [41]。我们发现, 在太阳风能区范围内, 除 $C^{5+} + H$ 体系 MCLZ 方法计算截面和实验截面偏差较大, 其他体系 MCLZ 方法产生的总截面数据与实验结果符合较好, 这为我们模拟太阳风离子电荷交换过程提供了便利。

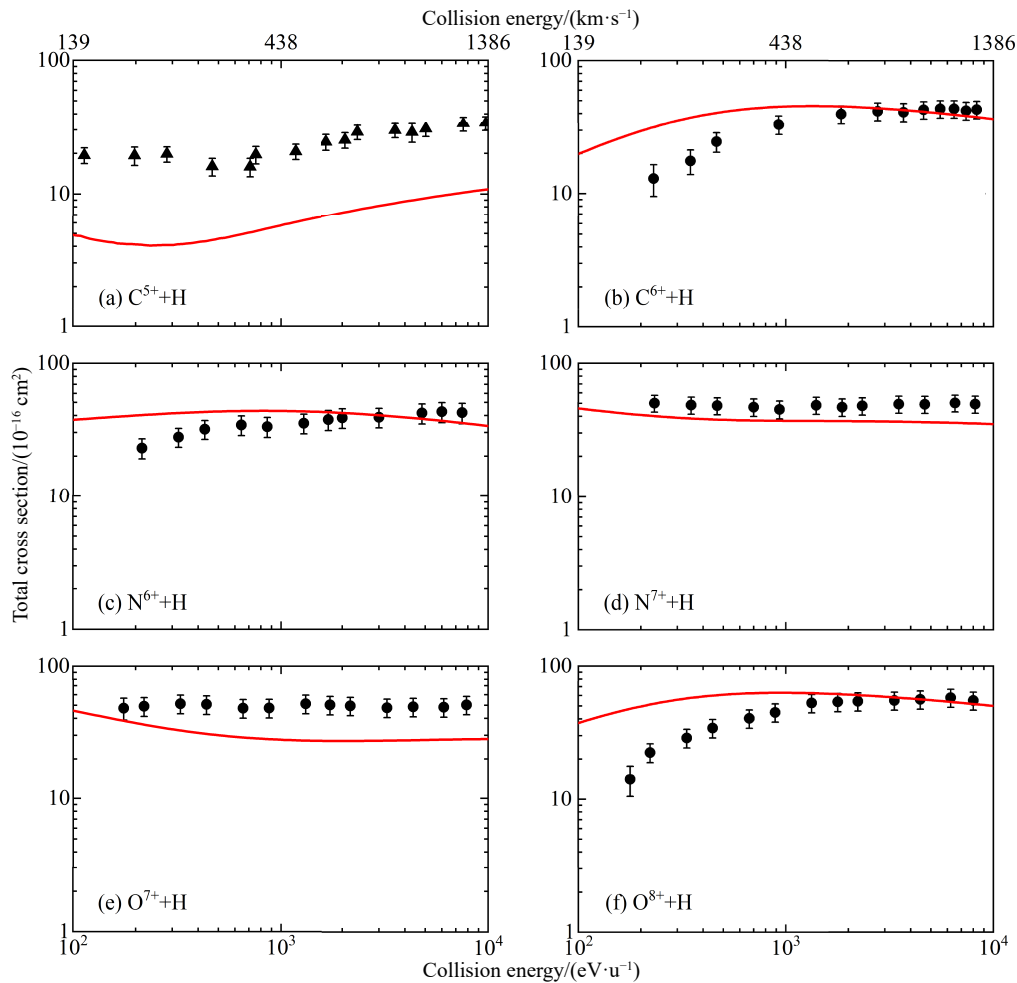


图 1 (在线彩图)采用 MCLZ 方法计算全裸或类氢的 C、N、O 离子与 H 原子电荷交换的总截面

▲ 来自 Draganić 等 [37] 的测量结果; ● 来自 Meyer 等 [38] 的测量结果。

通过与实验数据的对比, 我们证明了 MCLZ 方法在计算太阳风能区电荷交换单俘获总截面的可靠性。进一步, 我们需要知道 nl 分辨的态选择截面, 利用总截面对态选择相对截面归一得到态选择绝对截面, 并计算不同炮弹的 X 射线谱。对于高电荷态离子电荷交换形成的类氢离子和类氦离子, 实验上我们能够借助冷靶反冲离子动量谱仪测量 n 分辨的态选择截面。由于反应后类氢离子角动量子数 l 是简并的, 在能谱上区分不同角量子数的电子态十分困难。常用的处理手段是在 n 分辨的态选择截面上叠加 l 分布函数。对于类氢离子, 部分组态也存在能量简并。并且, 目前冷靶反冲离子动量谱仪其对反应能 Q 的能量分辨通常在 3~5 eV, 对类氢类氦的高电荷态离子角量子数 l 难以分辨。理论上, 基于量子力学的电荷交换理论对电荷交换过程的描述通常与实验符合更好。因此, 我们将 MCLZ 方法与 QMOCC 方法计算的态选择截面进行比较, 以检验 MCLZ 方法的可靠性。

图 2 展示了通过 QMOCC^[42] 和 MCLZ 方法计算的 $C^{5+} + H$ 态选择截面, 图 2(a)~(b) 分别对应俘获到主量子

数 $n=3$ 和 $n=4$ 的情况。在该碰撞体系和能量下, 俘获到主量子数 $n=3$ 和 $n=4$ 是主要的通道, 因此我们这里仅列举 $n=3$ 和 $n=4$ 的态选择截面并比较。在图 2(a) 中我们可以看到, MCLZ 方法计算俘获到 $n=3$ 的截面随着碰撞速度的增加而增加, 俘获角量子数 l 更大的电子态截面更大。俘获角动量 l 小的电子态截面随碰撞速度增加迅速增加, 对炮弹速度的变化更敏感。 $3d(^3D)$ 态在超过 $10 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$ 后出现下降趋势。QMOCC 方法计算的 $3s$ 电子态截面在炮弹能量大于 $6 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$ 后出现下降趋势, $3p$ 电子态截面在炮弹能量大于 $10 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$ 后出现下降, $3d$ 电子态截面在整个能量范围内上升并趋于平缓。图 2(b) 是 MCLZ 方法和 QMOCC 方法计算的 $n=4$ 的态选择截面。QMOCC 方法计算的截面整体上大于 MCLZ 方法计算的截面, QMOCC 的态选择截面在考虑的能区内变化不大。MCLZ 方法计算的截面在考虑的能区范围内是单调递减的。对比图 2(a) 和 (b), 我们发现: 随着炮弹碰撞速度的增加, $n=3$ 的态选择截面相比 $n=4$ 的态选择截面增加, 意味着电子更容易俘获到内壳层的电子态。类似的结果在大部分电荷交换实验当中也有印证^[43]。

对比 QMOCC 方法和 MCLZ 方法计算的 $C^{5+} + H$ 电荷交换态选择截面, 我们发现, MCLZ 方法比 QMOCC 方法计算的态选择截面偏低。并且, 两种方法计算态选择截面变化趋势也表现出差异, 这对天文电荷交换 X 射线谱的准确建模造成一定困难。为减小这种影响, 我们可以利用实验获得的总截面数据对 MCLZ 方法计算的 nl 分辨的态选择截面归一化, 以减小总截面在拟合过程中产生的影响。另一方面, 借助冷靶反冲离子动量谱仪, n 分辨的态选择截面数据是可以获得的, 这将进一步减小理论方法的误差。

图 3 展示了我们用 Kronos 程序包计算的 O^{8+} 和 H 原子电荷交换产生的 Lyman 系列 X 射线谱。图 3(a) 谱线分辨为 10 eV。位于 653 eV 的峰来自 Lyman α 的贡献, 位于 774 eV 的峰来自 Lyman β 的贡献, 位于 817 eV 的峰来自 Lyman γ 的贡献, 位于 836 eV 的峰来自 Lyman δ 的贡献。由于 $n \geq 6$ 的通道俘获截面很小, $n \geq 6$ 的贡献可以忽略。依据现有天文观测卫星搭载的光谱仪系统观测天文 X 射线谱, 例如 Chandra。其分辨在 50~100 eV^[8, 44]。为了与观测的分辨对应, 图 3(b) 计算了分辨为 50 eV 的 X 射线谱。由于谱线能量间隔小于分辨, 图 3(b) 中 Lyman β - δ 谱线不再能分辨。在小于 200 eV 的能区, 也存在丰富的软 X 射线和极紫外光子。这些谱线主要是由于跃迁到更高主量子数 n 的级联辐射产生的。

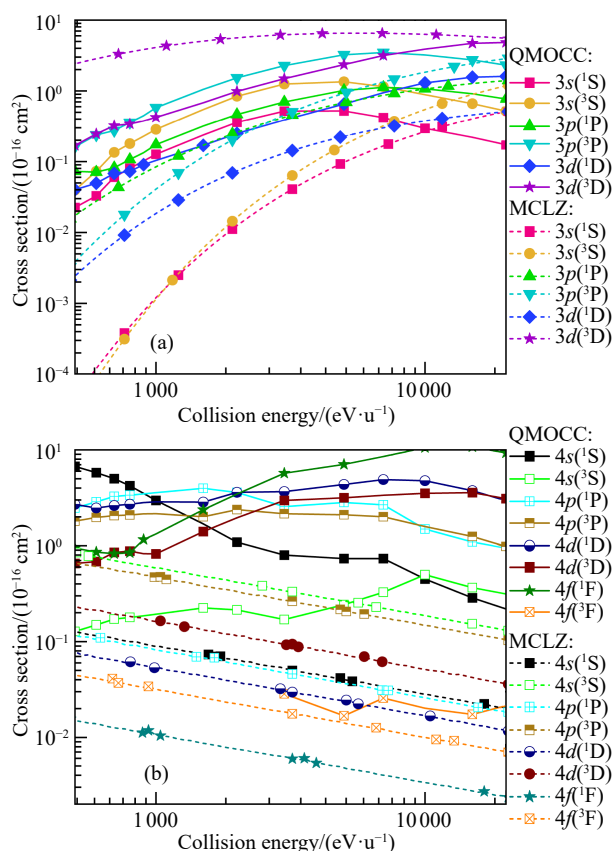


图 2 (在线彩图) $C^{5+} + H$ nl 分辨的态选择截面

(a) 计算 $n=3$ ($l=0, 1, 2$); (b) 计算 $n=4$ ($l=0, 1, 2, 3$) 主量子数下的态选择截面。实线为 QMOCC 方法计算的态选择截面, 虚线为 MCLZ 方法计算的态选择截面。

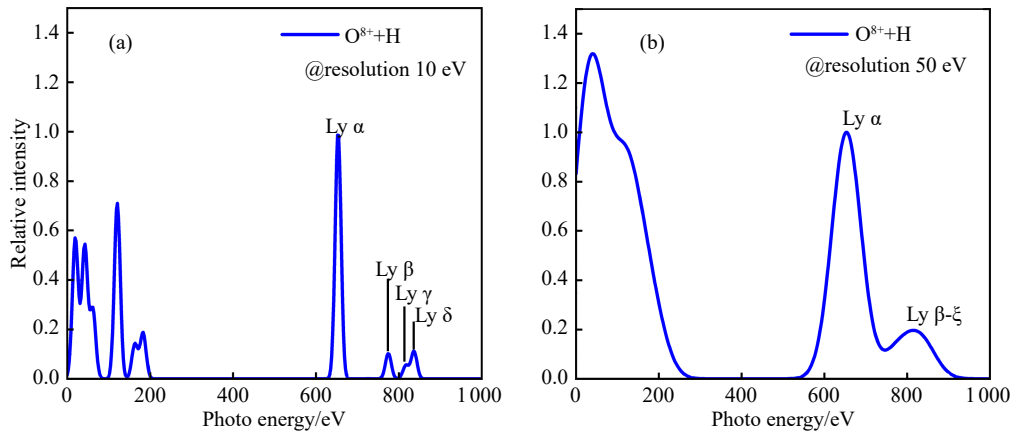


图3 (在线彩图)采用Kronos程序包,我们计算的 $O^{8+}+H$ 原子电荷交换X射线发射谱

(a)展示了分辨为10 eV的光谱;(b)展示了分辨50 eV的光谱。电荷交换截面计算方法采用MCLZ, l 分布模型采用统计分布。光子能量小于300 eV的峰来自于退激到 $n \geq 2$ 的自发辐射跃迁。

表1中列出了我们计算 $1 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$ 的 O^{8+} 与H原子电荷交换X射线光子能量、谱线发射截面和线强比。线强比定义为谱线与Lyman α 的相对比值。我们发现, Lyman δ 的线强比要比邻近谱线Lyman γ 和Lyman ϵ 大很多。MCLZ方法的计算结果表明,在该碰撞体系的电荷交换过程中,电子主要被俘获到 $n=5$ 的电子态。Janev和Winter提出低能离子电荷交换俘获最概然主量子数 $n_{\max}$ ^[22]的经验公式,如式(17)所示:

$$n_{\max} \sim q \left(\frac{I_H}{I_n} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{q-1}{\sqrt{2q}} \right)^{-1/2}, \quad (17)$$

其中: q 为离子的电荷态; I_H 是氢原子的电离能; I_n 为靶原子电离能。由该公式得到 O^{8+} 和H原子电荷交换最有可能俘获到 $n=5$ 的电子态。与当前MCLZ理论方法预测的最概然主量子数 n 一致。图4中,我们列出了不同方法^[45-46]计算的线强比Lyman β /Lyman α 、Lyman γ /Lyman α 和Lyman δ /Lyman α 随碰撞速度的变化关系。由于现有天文观测卫星分辨能力的限制, Lyman β 及之后的谱线不能分辨。因此,硬度比也是反映X射线谱性质的重要参数,其定义如式(18):

$$H = \sum_{n \geq 2} \frac{I(n \rightarrow 1)}{I(2 \rightarrow 1)}. \quad (18)$$

表1 $1 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$ $O^{8+}+H$ 电荷交换X射线线强比

发射线	光子能量/eV	谱线发射截面/(10^{-16} cm^2)	线强比
Lyman α	653.54	48.162 9	1.000 0
Lyman β	774.57	4.933 9	0.102 4
Lyman γ	816.93	2.588 4	0.053 7
Lyman δ	836.53	5.347 9	0.111 0
Lyman ϵ	847.18	0.050 3	0.001 0
Lyman ζ	853.60	0.000 0	0.000 0

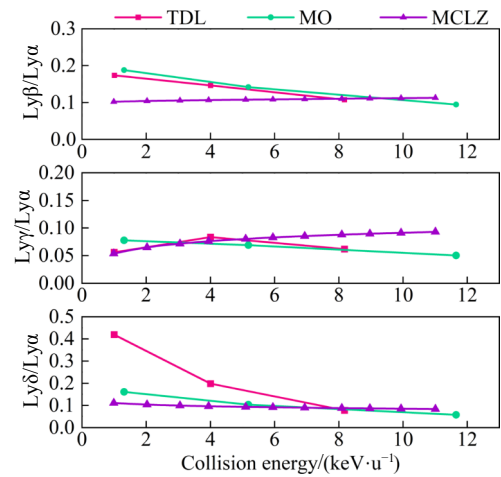


图4 (在线彩图) $O^{8+}+H$ 电荷交换X射线谱线强比Lyman β /Lyman α 、Lyman γ /Lyman α 和Lyman δ /Lyman α 随碰撞能量的变化关系

洋红色: 含时晶格方法^[44]; 绿色: 分子轨道方法^[46]; 紫色: 多通道Landau-Zener方法。MCLZ中 l 分布模型采用统计分布。

图5展示了采用MCLZ方法计算电荷交换截面,应用不同 l 分布函数得到的X射线谱硬度比随碰撞速度的变化关系。我们发现不同 l 分布函数产生的谱线硬度比差异很大。其中MCLZ方法+可分离分布和Janev推荐截面计算的硬度比随碰撞速度增加而下降。其他分布函数计算的硬度比随碰撞速度增加而上升。MCLZ方法+低能分布由于其最大布居的角动量 $l=1$,谱线硬度比很大。根据电荷交换的速度匹配关系,随着速度的增加,俘获到内壳层的相对截面将增加。由此我们可以推测,当角动量随速度的布居变化不敏感时,谱线硬度比将随着碰撞速度增加出现下降趋势。图5中不同 l 分布函数产生谱线硬度比可以从0.2到1.3之间变化,这表明采用不同 l 分布函数计算的谱型特征具有显著差异。因此,精确获取角动量 l 分布信息对于提高谱线线强比和硬度比计算准确性至关重要。

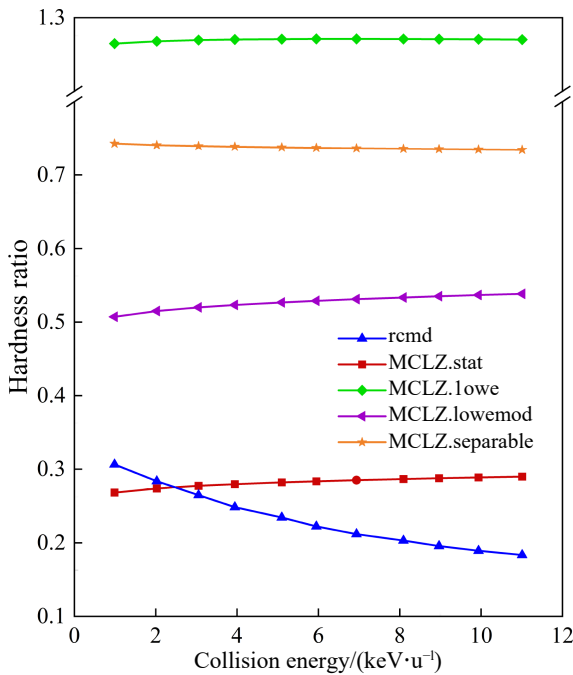


图5 (在线彩图) $O^{8+} + H$ 谱线硬度比随碰撞能量的变化关系

蓝色: Janev 推荐的态选择微分截面计算得到硬度比; 红色: MCLZ+统计分布; 绿色: MCLZ+低能分布; 紫色: MCLZ+优化低能分布; 橙色: MCLZ+可分离分布。

3 结论

本文研究了 MCLZ 理论方法在电荷交换 X 射线天文建模领域的准确性和适用性。我们对比了全裸和类氢的 C、N、O 离子与 H 原子电荷交换总截面和采用 MCLZ 方法计算的总截面。在典型太阳风速度范围内, MCLZ 方法计算的总截面和实验测量结果取得较好一致性。随后对比了 MCLZ 方法和 QMOCC 方法计算的 $C^{5+} + H$ nl ($n=3, 4$) 分辨的态选择截面随碰撞速度的变化关系。QMOCC 方法计算结果比 MCLZ 方法计算结果偏大, 两者计算的态选择截面随碰撞速度的变化趋势也不一样。这表明 MCLZ 方法在电荷交换天文 X 射线建模应用中不能准确描述电荷交换等离子体的密度和温度信息。我们计算了 $1 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1}$ $O^{8+} + H$ 电荷交换 X 射线谱, 并获得不同能量分辨率下的光谱线型。在统计分布模型下获得 $O^{8+} + H$ 发射谱的线强比和硬度随碰撞能量的变化趋势并与其他理论方法的计算结果进行比较。本文还对比了不同 l 分布模型下的谱线硬度比, 发现谱线硬度比对 l 分布函数十分敏感。当前研究表明, MCLZ 理论方法结合 l 分布模型会对天文电荷交换 X 射线谱建模带来较大误差, 亟需发展更准确的全量子理论计算方法以及开展高分辨的电荷交换态选择截面实验测量。

参考文献:

- [1] DÖRNER R, MERGEL V, JAGUTZKI O, et al. *Physics Reports*, 2000, 330(2): 95.
- [2] ULLRICH J, MOSHAMMER R, DORN A, et al. *Reports on Progress in Physics*, 2003, 66(9): 1463.
- [3] HAN J, WEI L, WANG B, et al. *ApJS*, 2021, 253(1): 6.
- [4] LINDGÅRD A, NIELSEN S E. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1977(6): 533.
- [5] WIESE W L, DETERS T M, FUHR J R, et al. Atomic Transition Probabilities for Carbon, Nitrogen and Oxygen[EB/OL].[2023-11-20].<https://api.semanticscholar.org/CorpusID:102587459>
- [6] LISSE C M, DENNERL K, ENGLHAUSER J, et al. *Science*, 1996, 274(5285): 205.
- [7] DENNERL K, ENGLHAUSER J, TRÜMPER J. *Science*, 1997, 277(5332): 1625.
- [8] LISSE C M, CHRISTIAN D J, DENNERL K, et al. *Science*, 2001, 292(5520): 1343.
- [9] BEIERSDORFER P, BOYCE K R, BROWN G V, et al. *Science*, 2003, 300(5625): 1558.
- [10] CRAVENS T E. *Astrophys J Lett*, 2000, 532(2): L153.
- [11] KOUTROUMPA D, LALLEMENT R, RAYMOND J C, et al. *Astrophys J Lett*, 2009, 696: 1517.
- [12] KATSUDA S, TSUNEMI H, MORI K, et al. *ApJ*, 2011, 730: 24.
- [13] FABIAN A C, SANDERS J S, WILLIAMS R J R, et al. *MNRAS*, 2011, 417(1): 172.
- [14] LIU J, MAO S, WANG Q D. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*, 2011, 415(1): L64.
- [15] MACHACEK J, MAHAPATRA D, SCHULTZ D, et al. *Phys Rev A*, 2014, 90: 052708.
- [16] BEIERSDORFER P, OLSON R E, BROWN G V, et al. *Phys Rev Lett*, 2000, 85: 5090.
- [17] HAVENER C C, HUQ M S, KRAUSE H F, et al. *Phys Rev A*, 1989, 39: 1725.
- [18] BODEWITS D, HOEKSTRA R. *Phys Rev A*, 2007, 76: 032703.
- [19] FOSTER A R, JI L, SMITH R K, et al. *Astrophysical Journal*, 2012, 756(2): 128.
- [20] LIYI G, KAASTRA J, RAASSEN A, et al. *Astronomy and Astrophysics*, 2015, 584.
- [21] ARNAUD K. XSPEC: The First Ten Years[C]//Jacoby G H, Barnes J. Astronomical Society of the Pacific Conference Series: volume 101 Astronomical Data Analysis Software and Systems V. 1996: 17.
- [22] JANEV R, WINTER H. *Physics Reports*, 1985, 117(5): 265.
- [23] LIU L, LIU C H, WANG J G, et al. *Phys Rev A*, 2011, (3): 032710.
- [24] CUMBEE R S, LIU L, LYONS D, et al. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2016, 458(4): 3554.
- [25] MULLEN P D, CUMBEE R S, LYONS D, et al. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 2016, 224(2): 31.
- [26] OLSON R E, SALOP A. *Phys Rev A*, 1976, (2): 579.
- [27] FRITSCH W, LIN C D. *Phys Rev A*, 1984, (6): 3039.
- [28] MINEO K, NEAL. The Low-energy, Heavy-particle Collisions—a Closecoupling Treatment[M]//Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics. Academic Press, 1989: 79.
- [29] ZHANG R T, LIAO T, ZHANG C J, et al. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2023, 520(1): 1417.

- [30] SALOP A, OLSON R E. [Phys Rev A](#), 1976, 13: 1312.
- [31] LANDAU L, LIFSHITZ E. 19 - on the Theory of Energy Transfer During Collisions[M]//PITAEVSKI L. Perspectives in Theoretical Physics. Amsterdam: Pergamon, 1992: 287.
- [32] ZENER C. [Proceedings of the Royal Society of London Series A](#), 1932, 137(833): 696.
- [33] JANEV R K, BELIĆ D S, BRANSDEN B H. [Phys Rev A](#), 1983, 28: 1293.
- [34] KRASNOPOLSKY V, GREENWOOD J, STANCIL P. [Space Science Reviews](#), 2004, 113: 271.
- [35] SMITH R K, FOSTER A R, EDGAR R J, et al. [ApJ](#), 2014, 787(1): 77.
- [36] ABRAMOV V, BARYSHNIKOV F, LISITSA V. *ZhETF Pisma Redaktsiiu*, 1978, 27: 494.
- [37] DRAGANIĆ I N, SEELY D G, HAVENER C C. [Phys Rev A](#), 2011, 83: 054701.
- [38] MEYER F W, HOWALD A M, HAVENER C C, et al. [Phys Rev A](#), 1985, 32: 6.
- [39] BODEWITS D, HOEKSTRA R, SEREDYUK B, et al. [The Astrophysical Journal](#), 2006, 642(1): 593.
- [40] WARGELIN B J, BEIERSDORFER P, BROWN G V. [Canadian Journal of Physics](#), 2008, (1): 151.
- [41] GOLDSTEIN B E, NEUGEBAUER M, BALSIGER H, et al. Giotto-IMS Observations of Ion-flow Velocities and Temperatures Outside the Magnetic Cavity of Comet P/Halley[M]//GREWING M, PRADERIE F, REINHARD R. Exploration of Halley's Comet. Berlin, Heidelberg: Springer, 1988: 174.
- [42] NOLTE J L, STANCIL P C, LIEBERMANN H P, et al. [J Phys B](#), 2012, 45(24): 245202.
- [43] RYUFUKU H, SASAKI K, WATANABE T. [Phys Rev A](#), 1980, 21(3): 745.
- [44] BROMLEY S J, PINDZOLA M, BODEWITS D, et al. [Astrophysical Journal Supplement Series](#), 2022, 262(2): 47.
- [45] PINDZOLA M S, FOGLE M, STANCIL P C. [J Phys B](#), 2018, 51(6): 065204.
- [46] SHIPSEY E J, GREEN T A, BROWNE J C. [Phys Rev A](#), 1983, 27(2): 821.

X-ray Emission Following Charge Exchange Between Slow Highly Charged Ions and Atomic H and Its Astronomical Application

ZHANG Chijun^{1,2}, LIAO Tian³, ZHANG Ruitian^{1,2,†}, ZHU Xiaolong^{1,2}, GUO Dalong^{1,2}, GAO Yong^{1,2},
XU Shenyue^{1,2}, ZHANG Shaofeng^{1,2}, MA Xinwen^{1,2,†}

(1. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China;

3. Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-sen University, Zhuhai 519082, Guangdong, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Experimental and theoretical research on X-ray emissions following charge exchange between slow highly charged ions and atomic Hydrogen supply vital atomic data for the study of diagnosing and modeling plasmas in non-equilibrium astrophysical environment. In the present paper, employing the semiclassical multi-channel Landau-Zener (MCLZ) method, we calculated the total cross-section of bare and hydrogenic C, N, and O ions charge exchange with hydrogen atoms, and compared it with previously reported experimental results. In $C^{5+} + H$ collision, theoretically calculated cross-sections have large differences with experimental cross-sections. We also compared state-selective cross-sections calculated by classical MCLZ and quantum-mechanical molecular orbital close-coupling (QMOCC) methods in the solar wind ion velocity (or energy) range. For capture to $n = 3$ shell, MCLZ calculated state-selective cross-section increases with collision energy increasing; For capture to $n = 4$ shell, MCLZ calculated state-selective cross-section decreases with collision energy increasing; It is lower than two magnitudes as the QMOCC method calculated cross-section at the low energy end. Finally, using the Kronos program package developed in the astrophysical field, we calculated the X-ray emission spectrum, line ratio, and hardness ratio of charge exchange of $1 \text{ keV} \cdot \text{u}^{-1} \text{ O}^{8+} + H$ by means of the recommended cross-section by Janev [Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1999, 55(2): 201], and contrast with the MCLZ method calculated results. We consider that the MCLZ calculation combine with l distribution model has a large uncertainty, which could affect the accuracy of the astrophysical environment modeling. It is required to develop a more accurate full quantum theory.

Key words: slow highly charged ions; charge exchange; X-ray; astrophysical plasma

Received date: 22 Jul. 2023; Revised date: 29 Nov. 2023

Foundation item: National Key Research and Development Program of China (2017YFA0402400215, 2017YFA0402300)

† Corresponding author: ZHANG Ruitian, E-mail: zhangrt@impcas.ac.cn; MA Xinwen, E-mail: x.ma@impcas.ac.cn