arXiv:2601.03711v1 [physics.atom-ph] 7 Jan 2026

# 电子俘获诱导的 $CO_2^{3+}$碎裂：入射离子电荷对顺序和协同解离路径的影响

Akash Srivastav，[1]，* Sumit Srivastav，[1,2] 和 Bhas Bapat[1]

[1] *Indian Institute of Science Education and Research Pune, Homi Bhabha Road, Pune 411008, India*[2]现地址：*Normandie Univ., ENSICAEN, UNICAEN, CEA, CNRS, CIMAP, 14000 Caen, France*

我们研究了与氩$^{q+}$ 入射粒子慢碰撞时产生的 $CO_2^{3+}$ 的 $O^+$: $C^+$: $O^+$ 碎裂通道（$4 \leq q \leq 16$，速度为 $\approx 0.3$ 原子单位）。利用本征坐标系方法，我们区分了顺序和协同解离过程及其相应的动能释放（KER）分布。计算了 $CO_2^{3+}$ 的 *Ab initio* 势能曲线，并将其映射到 KER 能谱，以识别碎裂过程中涉及的相关电子态。尽管在不同入射离子电荷范围内，顺序 KER 分布几乎保持不变，但协同 KER 分布随入射离子电荷呈现显著但非系统性的变化。此外，在氩$^{4+}$ 碰撞中观察到约 15.5 eV 的低 KER 特征，此前该特征曾与电子和质子碰撞中的顺序解离相关；在氩$^{6+}$ 碰撞中也观察到了这一特征，但程度较弱。该特征主要源于低能级的 $^2\Pi_g$ 和 $^{2,4}\Pi_u$态的协同解离。对于某些入射粒子，两种解离路径的分支比偏离简单的单调变化趋势；除这些例外情况外，协同解离的比例随 $q$ 增大而降低，而顺序解离的比例则升高。这些发现强调，要全面理解慢速高电荷态离子碰撞中的碰撞动力学，必须考虑入射粒子的详细电子结构，而不能仅看其电荷。

## I. 引言

对多重带电分子离子（MCMI）的形成与碎裂动力学的研究，是当代原子与分子物理中一个核心且快速发展的研究领域。通过与高电荷态离子（HCI）碰撞，是生成这类物种的一种重要途径；这一过程与基础物理学、行星科学 [1–4], 和辐射生物学 [5, 6]均密切相关。根据入射粒子的速度（$v$），多重带电分子离子的形成可通过多种机制实现，例如直接电离（所有被电离的电子均被射入连续态）、多电子俘获，或转移电离（TI，即部分电子被俘获，其他电子则被射入连续态）。在慢碰撞（$v < 1$ 原子单位）中，多电子俘获占主导地位 [7–10]。俘获过程在慢速高电荷态离子-中性粒子碰撞中尤为关键 [11, 12] ，在天体物理学 [1–3, 13, 14]以及聚变研究中的等离子体诊断 [15, 16]领域也具有重要意义。

通常，多重带电分子离子不稳定，会解离为带电碎片和中性碎片。碎裂可以通过协同过程发生，即所有化学键几乎同时断裂；也可以沿连续路径发生，经由亚稳中间体逐步断键。

Neumann等人 [17] 表明，沉积到靶中的总能量是控制顺序碎裂和协同碎裂动力学的关键参数。沉积的能量在各种激发电子态之间按统计方式分配，而相对布居数最终决定这些态的顺序解离和协同解离动力学。

从经典观点来看，转移到靶上的能量取决于入射粒子的电荷 $q$、速度$v$和碰撞参数 $b$。其中， $q$ 和 $v$ 可以在实验中加以控制，预计这些参数的变化会改变各种激发态的相对布居，进而影响整体碎裂动力学。许多研究考察了 $q$ 和 $v$ 的变化如何影响解离电离，尤其是双原子分子和三原子分子。碎片动能之和，即动能释放（KER），是理解能量沉积以及由此导致的分子离子电子态布居的关键参数。因此，实验研究 KER 对 $q$ 或 $v$的依赖关系十分重要。

对于只能发生协同解离的双原子分子，Folkerts等人研究了 CO 在与 0.4 a.u. $He^{2+}$ 和 $O^{7+}$ 离子碰撞时的解离 [18], ，并根据动能释放分布得出结论：较低的 $q$ 会导致 $CO^{2+}$更高的激发。Khan等人考察了 $O^{q+}$—$N_2$ ($q = 2$，4，6) 体系在 $v = 1.0$、1.5 和 2.0 a.u. 下的 $q$ 和 $v$ 效应 [19], ，发现增大 $q$ 或减小$v$ 都会持续产生较温和的碰撞，并降低能量转移。对于既可能发生协同解离、也可能发生顺序解离的三原子分子，Wales等人研究了 OCS 在 0.25 a.u. $Ar^{4+}$ 撞击和 0.35 a.u. $Ar^{8+}$ 撞击下的三体解离 [20], ，发现 $q = 4$，8 时的动能释放分布几乎相同。对于 0.49 a.u. $Ar^{q+}$ 撞击 $CO_2$ ($q = 3$，6，8) 的碰撞，Kumar等人发现，$Ar^{6+}$ 会产生最宽的动能释放分布[21]。该团队 Srivastav等人近期的研究分析了质子和 $Ar^{q+}$ ($8 \leq q \leq 14$) 入射粒子诱导的 $CO_2$ 三体解离中 $q$ 和 $v$ 的依赖关系

* akash.srivastav@students.iiserpune.ac.in

[22, 23]。他们表明，质子速度的微小变化会显著改变解离过程，而且动能释放分布对 $q$有明显的依赖性。

由于 $q$ 和 $v$ 都会影响碰撞中沉积的能量，因此它们的作用会反映在顺序解离与协同解离机制的相对主导程度上。尽管已有不少研究探讨了顺序和协同碎裂的动力学[17, 20, 22–29], ，但只有少数研究考察了它们对碰撞参数 $q$ 或 $v$的依赖性。相关研究也仅涉及有限的参数范围[22, 23]。因此，有必要探究顺序和协同解离动力学如何随 $q$ 和 $v$ 在较大范围内变化。

在固定碰撞速度（对于 $v \leq 1.0$ 原子单位）下，若观察到动能释放分布随 $q$ 呈现系统性变化趋势 [18, 19]，研究者曾据此认为，入射离子电荷增加会使碰撞过程更加温和。然而，近期研究表明，这一结论并非总是成立，尤其是在多电子俘获占主导的碰撞区域 [21, 22]。在适用于慢碰撞的准分子曲线交叉框架中，电子俘获被视为入射通道与出射通道之间的准共振跃迁。在此框架下，电子俘获对碰撞后入射离子中可用末态的束缚能十分敏感。因此，决定碎裂动力学的可能是入射粒子的详细电子结构，而非仅仅是其电荷。

在本研究中，我们考察了由 $Ar^{+}$:$C^{+}$:$O^{+}$ 碎裂通道，该通道由 $Ar_2^{3+}$产生$^{q+}$ $(4 \leq q \leq 16)$ 入射粒子引发，碰撞速度为 0.27 a.u.；对于 $Ar^{4+}$，碰撞速度为 0.31 a.u.$^{q+}$ $(q \geq 6$。尽管已使用各种入射粒子对这一碎裂通道进行了广泛研究[17, 21, 23–26, 30–33]，我们的系统与 [17, 21, 30] 的系统十分相似，但碰撞速度略低，且涵盖的入射离子电荷范围更广。采用本征参考系方法 [27, 28], ，我们区分了顺序和协同碎裂路径，并报告了各自的 KER 分布。结果发现，所有入射粒子的顺序解离 KER 分布几乎相同；而协同解离的 KER 分布则呈现显著差异，但与 $q$不存在系统性依赖关系。我们计算了从头算得到的CO 各种电子态的势能曲线$_2^{3+}$，并将其与 KER 数据对应，以确定参与其中的电子态。此外，我们还考察了两种解离路径的分支比随 $q$变化的趋势。研究结果表明，要理解这些低速碰撞区域内的碰撞动力学，重要的是考虑入射粒子的电子结构，而不仅仅是其电荷。

## II. 实验细节

实验在 IISER Pune 的电子束离子源（EBIS）装置上进行。EBIS 能够提供能量范围为（5−30）keV/$q$ [34] 的入射离子。实验采用了满足 Wiley-McLaren 空间聚焦条件 [35] 的多重击中离子动量谱仪（IMS），以研究分子离子的碎裂动力学。通过连接在 IMS 下游的圆柱偏转分析器（CDA），可以分析入射粒子碰撞后的电荷态。IMS 和 CDA 的详细信息见其他文献 [36, 37]；此处仅简要介绍实验方案。

由 EBIS 提供的入射束在 IMS 中心处以交叉束几何构型与喷射式 $CO_2$ 气体靶重叠。碰撞产生的反冲离子和碎片离子在均匀抽取场的作用下被引导至离子探测器；该抽取场的强度为 60 V/cm，方向垂直于入射束和气体射流的方向。离子探测器由一对直径为 80 mm、采用人字形构型的微通道板组成，并与延迟线探测器耦合，以获取撞击探测器粒子的二维位置（$x$, $y$）。同一电场将碰撞中逸出的电子引导至安装在离子探测器对面的通道电子倍增器探测器。

本实验研究了 $Ar^{q+}$ $(4 \leq q \leq 16)$ 以接近 0.3 a.u. 的速度撞击 $CO_2$ 的情形： $v$ =0.27 a.u. 对应于 $q = 4$ ，而 $v = 0.31$ a.u. 对应于 $q \geq 6$。典型束流为 $\approx 10$ pA，背景压力为几 $10^{-7}$ mbar，从而确保了较低的偶然符合率和单次碰撞条件。

碎片离子和反冲离子与逸出电子或电荷发生变化的入射粒子符合探测，其中任一类粒子的探测均可作为触发信号，用于测量碎片离子和反冲离子的飞行时间（$t$）。本研究采用逸出电子作为触发信号。对于每次碰撞事件，均以列表模式格式记录探测粒子的（$t, x, y$）信息，以供离线分析。根据（$t, x, y$）数据重建碎片动量分量（$p_x, p_y$, $p_z$），从而确定碎片的动能，进而得到动能释放。采用 60 V/cm 的抽取场时，对于能量不超过 4.8 电子伏特/$q$ 的离子，三体动能释放分辨率约为 1 电子伏特，收集效率为 $4\pi$ 。

## III. 势能曲线的计算细节

中性 $CO_2$ 基态和解离为 $O^{+}$:$C^{+}$:$O^{+}$的 $CO_2^{3+}$若干激发态的势能曲线（PEC）采用 GAMESS 程序套件 [38]中的 从头算方法计算。参考波函数通过完全活性空间多组态自洽场（CAS-MCSCF）方法生成，随后采用二阶多参考 Møller-Plesset（MRMP）微扰理论，以纳入动态电子相关。采用 Dunning 型相关一致

基组，并在整个计算过程中加入一组弥散函数（aug-cc-pVTZ）。中性 $CO_2$ 基态的电子组态为（$1\sigma_g^{\ 2}\ 1\sigma_u^{\ 2}\ 2\sigma_g^{\ 2}\ 3\sigma_g^{\ 2}\ 2\sigma_u^{\ 2}\ 4\sigma_g^{\ 2}\ 3\sigma_u^{\ 2}\ 1\pi_u^{\ 4}\ 1\pi_g^{\ 4}$）$^1\Sigma_g^+$

（）（）（）（）（）（）（）（）（）。在 MCSCF 和 MRMP 计算中，三个芯轨道保持冻结，而全部十二个价轨道均作为活性轨道，从而实现对电子相关的平衡处理。密度收敛判据设为 $10^{-6}$，以确保虚轨道充分收敛。分子对称性在 $D_{2h}$ 点群下处理。针对双重态、四重态、六重态和八重态自旋多重度，在对应不同分子对称性的多个不可约表示范围内生成势能曲线（PEC）。在所有 PEC 计算中，分子离子保持线性构型，对两个碳氧键进行对称伸缩，键长从 1.0 到 4.0 °A，步长为 0.02 °A。计算得到的 $CO_2$ 平衡几何构型键长为 1.17 °A，与已确立的 1.162 °A 数值符合良好。

CO 的计算势能曲线$_2^{3+}$对应于各对称性和自旋多重度下最低的绝热态，如图1(a)所示，同时还展示了这些态渐近对应的三个最低解离极限。所有能量均以中性 CO 的平衡几何构型为参照$_2$ ($^1\Sigma_g^+$)（参见图 1(b)）。我们的计算结果在势能曲线形状以及以 CO 的平衡几何构型为参照的能量方面，与 Wang 等人 [25] 的结果一致$_2$, ，但最低解离极限（$D_1$）比他们的数值低约 2.6 电子伏特。为解决这一差异，图 1(b)中将基态（$^2\Pi_g$）CO 的势能曲线与经典库仑势能曲线一并展示；后者相对于中性 CO 的平衡几何构型$_2^{3+}$在能量上平移了 $D_1$。$O_2$: $C^+$: $O^+$体系的经典库仑势能$^+$ 为:

$$V = 14.4\left(\frac{2}{R_{C-O}} + \frac{1}{R_{O-O}}\right) + D_1 \qquad (1)$$

其中 $R_{C-O}$ 和 $R_{O-O}$ 是以 °A 为单位的核间距。在核间距较大时，经典库仑曲线与 $^2\Pi_g$ 态的势能曲线（PEC）高度吻合，这验证了我们计算所得解离极限的物理准确性。

## IV. 结果与讨论

碰撞导致的 $CO_2^{3+}$ 激发态衰变，可通过协同路径进行，即两个 C–O 键几乎同时断裂；也可通过顺序路径进行，其中涉及.....

在第一步形成瞬态 $CO^{2+}$ 分子离子，随后在第二步发生碎裂。为分析这两种路径的解离动力学，有必要区分导致顺序碎裂和协同碎裂的碰撞事件。利用本征坐标系方法，我们将与

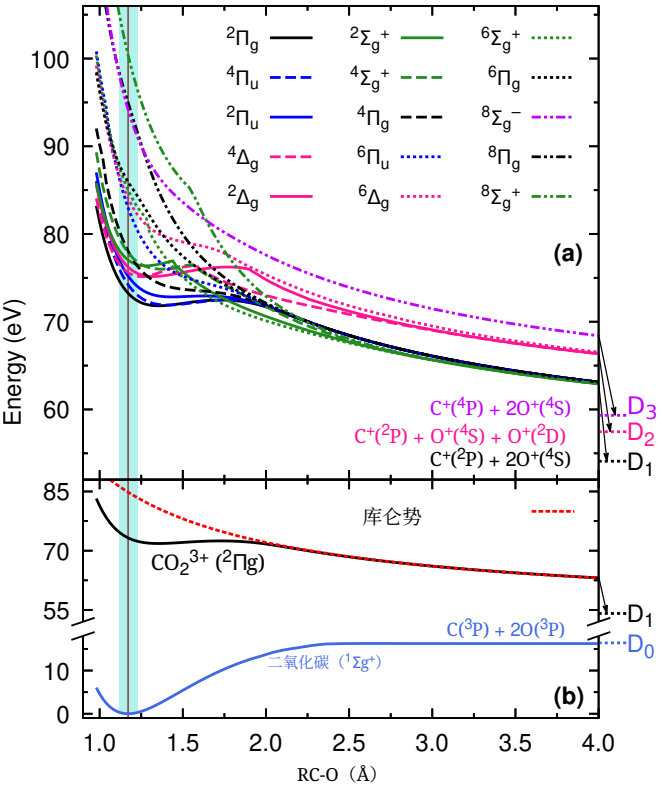


图 1。（a）$CO_2^{3+}$ 基态和激发态的势能曲线（PEC），根据 C–O 键的对称伸缩计算得到。$D_1$, $D_2$, 和 $D_3$ 表示这些势能曲线渐近对应的最低解离极限。（b）$CO_2$ ($^1\Sigma_g^+$)和 $CO_2^{3+}$ ($^2\Pi_g$)基态的势能曲线。同时还给出了经典库仑势能曲线，其能量经 $D_1$ 平移（见正文）。竖直色带表示 Franck–Condon 区域。所有能量均以中性 $CO_2$的平衡几何构型为参考。

各解离机制相关的事件区分开来，并分析其各自的动力学，尤其关注 KER 分布。

### A. 区分顺序解离与协同解离

牛顿图和达利茨图是分析顺序和协同碎裂机制的标准工具 [17, 23–26, 32, 33]。在图2(a)中，我们展示了 $CO^+$:$C^+$:$O^+$ 解离通道的牛顿图。选取其中一个 $O_2^{3+}$离子的动量矢量作为参考方向（沿$x$轴），并将其归一化为单位长度。然后，将另一个 $O^+$ 离子和第三个 $C^+$ 离子的动量矢量按相对于参考 $O^+$ 离子动量的大小缩放后，分别绘制在上、下半平面中。在这种表示中，顺序解离事件呈现出特征性的半圆形结构，而协同解离事件则形成新月状图

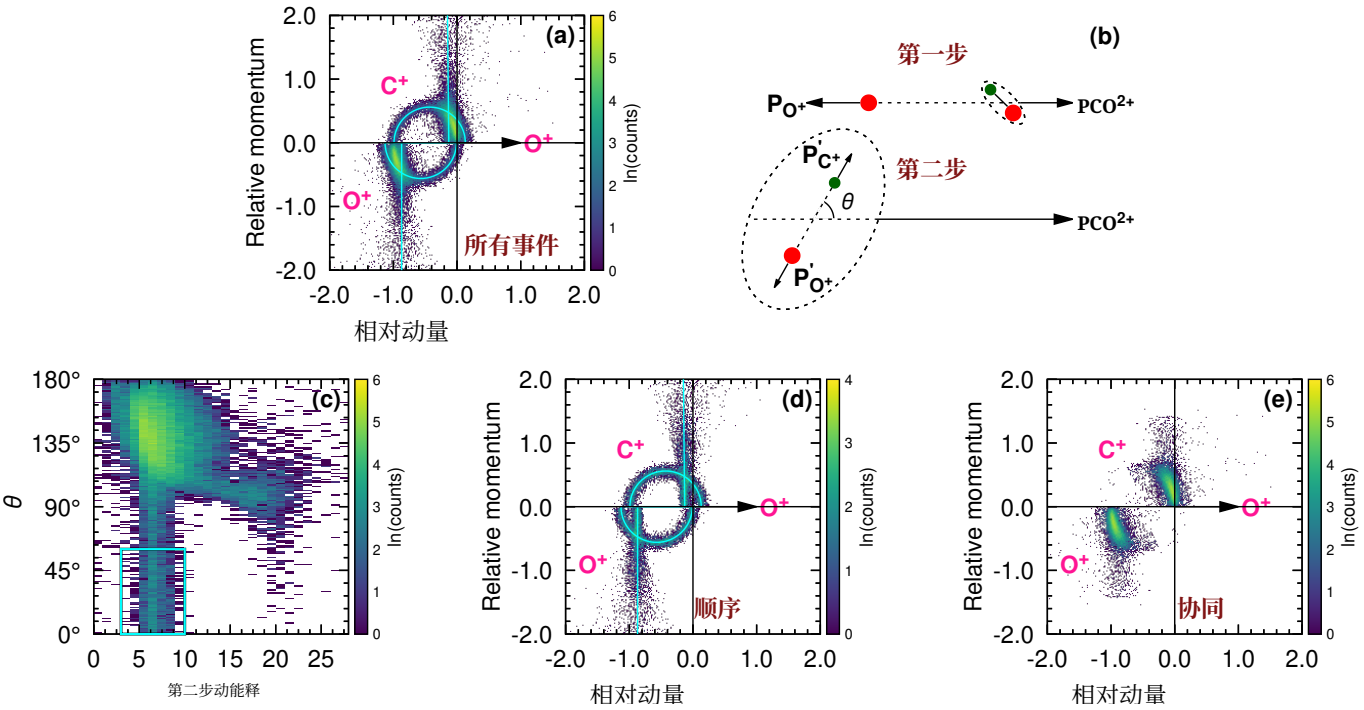


图 2. 与 0.31 a.u. 氩$^{10+}$ 入射粒子碰撞产生的 $CO_2^{3+}$ 中 $O^+$:$C^+$:$O^+$ 解离通道的本征坐标系分析。(a) 所有事件的牛顿图。(b) 顺序解离示意图：第一步形成的 $CO^{2+}$ 随后在第二步解离为 $C^+$ 和 $O^+$ 。带撇号的量表示 $CO^{2+}$ 质心系中的动量矢量，不带撇号的量表示 $CO_2^{3+}$ 质心系中的动量矢量。 $\theta$ 表示两次解离方向之间的夹角。(c) 所有事件在第二步 $CO^{2+}$ 质心系中的动能释放（$KER_2$）和 $\theta$ 上的分布。矩形区域内的事件用于重建该区域外的顺序事件。(d) 顺序事件的牛顿图；(e) 经本征坐标系分析区分出的协同事件的牛顿图。在牛顿图中，最先探测到的 $O^+$ 离子被选作参考离子，并归因于 $CO^{2+}$ 解离。

案。不过，这两组事件在这种表示中有大量重叠，因此难以确定两种解离路径的分支比。达利茨图表示中也存在类似的重叠（未示出）。

本征坐标系方法克服了这一局限[27, 28]。该方法利用了这样一个事实：如果中间双阳离子的寿命远长于其转动周期，那么 $\theta$ 第一次与第二次解离步骤之间的夹角（见图2(b)）预计会呈均匀分布。

在以（$KER_2$，$\theta$）为变量绘制所有事件的二维图时，可以清楚地看到这种均匀分布（图2(c)），其中 $KER_2$ 是中间 $CO^{2+}$ 分子离子在质心坐标系中的动能释放。由于两个 $O^+$ 离子中的任意一个都可能在第一步中分离，因此会出现两种这样的分布。本文对它们分别进行了分析。

在本例中，顺序解离事件表现为一条均匀分布、以动能释放为中心的垂直条带$_2$ = 60.5 电子伏特。在顺序事件能够明确分离的区域（在图 2(c)中以矩形标出）可作为模板，用于重建整个顺序事件条带。重建的详细信息见 [27, 28]。这种重建能够生成可唯一归因于顺序解离的各种运动学变量分布。将顺序事件的分布从总分布中减去，即可得到协同事件的分布。顺序事件和协同事件各自分离后的牛顿图分别见图2(d)、(e)。前者清晰呈现出仅与顺序事件相关的半圆形结构，而后者则显著呈现出与协同事件相关的新月形结构。

### B. 动能释放分布

我们分析了 $O^+$:$C^+$:$O^+$ 解离通道$_2^{3+}$，该通道产生于与氩$^{q+}$ 入射粒子（$4 \le q \le 16$）的碰撞中。图3展示了每种入射粒子对应的所有事件的 KER 分布，以及分离出的顺序事件和协同事件的 KER 分布。总动能释放分布始终在 20.5电子伏特处呈现出明显峰值，同时在 ∼25 电子伏特以上伴有宽肩峰，并延伸出高能尾部，最高可达 45–50 电子伏特。顺序解离的 KER 分布在约 20 电子伏特处显示出显著峰值，并且几乎不随入射离子电荷的变化而改变。相比之下，协同解离的 KER 分布

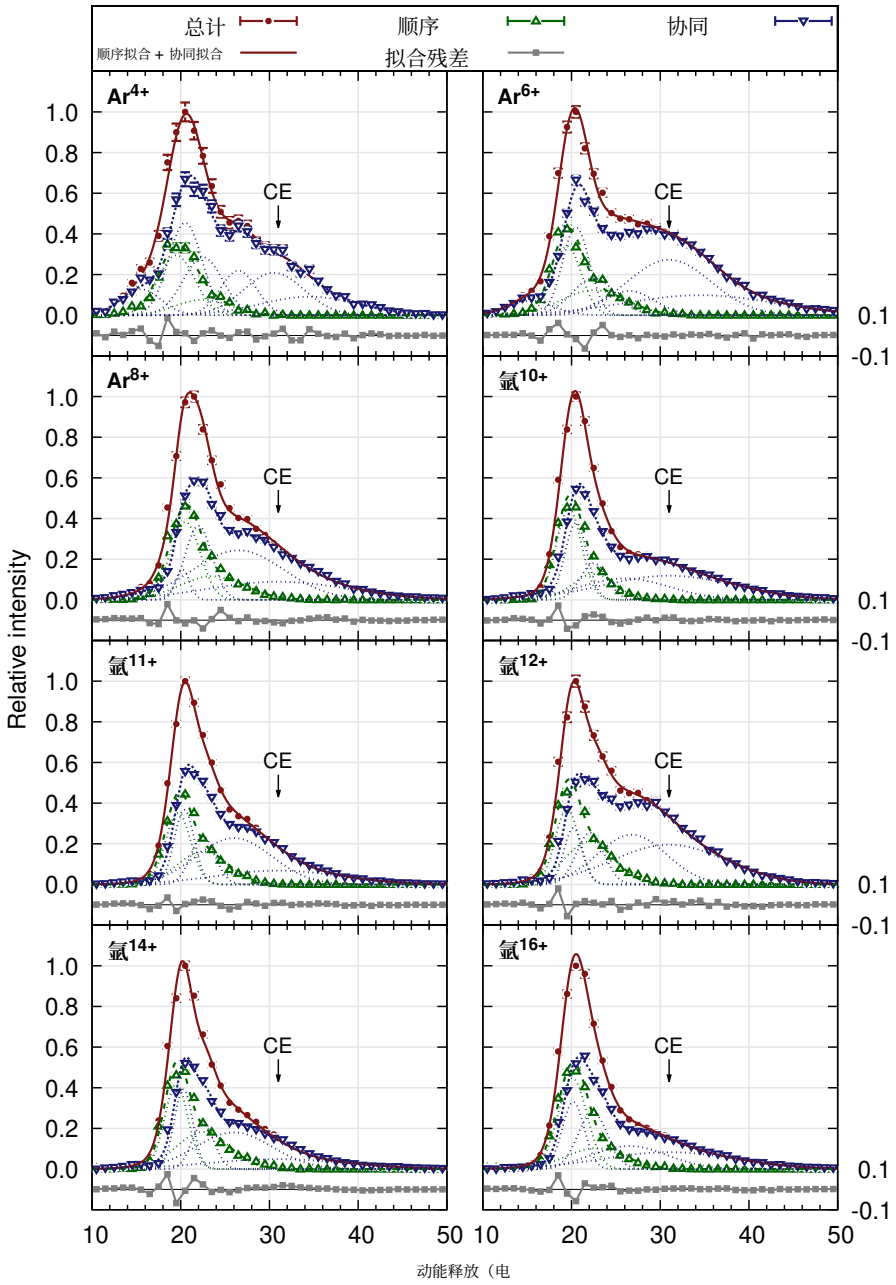


图 3. 对于不同氩$^{q+}$ 入射粒子，$CO_2^{3+}$ 的 $O^+$: $C^+$: $O^+$ 解离通道的动能释放分布。采用本征坐标系方法（见正文）将总动能释放分布分解为顺序路径和协同路径的贡献。每幅图中的所有 KER 能谱均按总动能释放分布的最大值归一化。分别用多个高斯函数之和拟合对应于顺序解离和协同解离机制的 KER 能谱，并以实线表示组合拟合结果。每幅图下方显示组合拟合的拟合残差。箭头表示 CE模型预期的 KER 值。实验数据的误差棒表示统计不确定度。

显示出一个位于约 21 电子伏特处的主峰，以及在约 ~25 电子伏特处的宽肩峰，该特征在所有入射粒子中均可观察到，而高能特征则随入射离子电荷发生显著变化。协同 KER 分布呈现出延伸的高能尾部，最高可达 45–50 电子伏特。在氩$^{4+}$ 入射粒子的协同解离中，还观察到了位于 15.5 eV 附近的明显低能特征；在氩$^{6+}$的情况下也可微弱观察到，但在更高电荷态下则不存在。

低于 ~25 eV 的动能释放区间同时包含顺序解离和协同解离的贡献，而较高能部分则主要源于协同碎裂。这一观察结果与先前对同一碎裂通道进行类似分析的研究一致 [17, 23–25]。总动能释放分布的整体特征也大体一致

涉及多种入射粒子的先前研究 [17, 21, 23–25], 不过，相对强度有所不同。文献 [26, 31, 32] 报道了显著差异。例如，Yan等人 [26] 发现，在与 1.5 a.u. 的 $Ne^{4+}$ 入射粒子碰撞时，KER 分布在约 34 eV 处出现一个宽峰，在约 21 eV 处还有一个略弱的峰。Jana 等人 [32]发现，14.2 a.u. 的 $Si^{12+}$ 入射粒子的主要 KER 峰位于 26.8 eV。类似地，Siegmann等人 [31], 在与 $Xe^{18+}$ （15.4 a.u.）、$Xe^{43+}$ （15.4 a.u.）和 $He^{+}$（1.6 a.u.）碰撞时，报告了更高的 KER 峰，位于 31–35 eV 范围内，且尾部延伸至 70 eV 以上。此外，此处 25 eV 以上的高能结构呈现为宽肩峰，而在电子碰撞碎裂中则表现为约 27 eV 处一个明显的次峰 [25]。与本次碰撞研究中占主导地位的多电子俘获机制不同，在先前的高能碰撞体系中，直接电离或 TI 过程被认为是主要机制[26, 31, 32]。此外，Yan等人 [26] 发现，顺序解离的 KER 分布可能出现两个明显的峰，分别位于 21 eV 和 28.5 eV；这与此处氩入射粒子产生的约 20 eV 单峰形成对比$^{4+}$，尽管两种入射粒子的电荷相同。因此可以看出，碎裂动力学的差异取决于主要的电离机制。

氩的总动能释放分布在 $Ar^{6+}$ 撞击（$\sigma \sim 7.6$ 电子伏特）时最宽，在 $Ar^{11+}$ （$\sigma \sim 5.4$ 电子伏特）时最窄，这与先前对 $Ar^{6+}$ [21]的研究结果一致，但分布略窄；这是因为后续实验的高能离子收集效率有所提高。图 3中的竖直箭头标示了经典库仑爆炸（CE）模型预期的动能释放。显然，CE模型高估了观测到的动能释放峰；这也在意料之中，因为这个简单模型完全忽略了靶电子结构。

为了确定参与不同解离类型的电子态，我们将观测到的顺序解离和协同 KER 分布中的特征，与根据 $CO_2^{3+}$ 的势能曲线计算出的模态 KER 值进行匹配。这些理论模态 KER 值汇总于表 A1，计算时假设发生 Franck–Condon 跃迁，这与较短的碰撞时间尺度（$\approx 1$ 飞秒）相符。我们分别用多个高斯分布之和拟合两类 KER 分布，并将振幅和宽度设为拟合自由参数。根据清晰的谱特征确定质心。对于 $q \leq 6$ 和 $q > 6$，纳入的高斯函数数量有所不同，因为在 $q \leq 6$中观测到的特征更多。质心及其对应的最可能电子态列于表 A2。指定电子态时，我们纳入了表 A1所列的全部三个解离极限。

总体而言，所有入射粒子参与的电子态集合基本相同。总 KER 分布中的主峰同时来自顺序和协同解离机制（参见图3），主要通过低能级的 $^{2,\ 4}\Pi_{g,\ u}$ 和 $^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ 态产生； $^2\Delta_g$态也可能通过顺序碎裂对这一峰有所贡献，解。相比之下，高KER肩峰中27 eV和31 eV附近的特征，分别主要归因于高能级的$^6\Pi_{g,\ u}$、 $^6\Delta_g$、$^6\Sigma_g^+$ $^6\Sigma_g^+$ $^6\Pi_g$ 和态的协同解离。最后，延伸的高KER尾部（超过 ~40 电子伏特）也可能包含来自 $^8\Pi_g$ 和 $^8\Sigma_g^+$ 态的贡献。

在 $Ar^{4+}$ 中观察到的总 KER 分布在 15.5 eV 附近有一个显著的低能特征，在 $Ar^{6+}$ 中也有这一特征，但不太明显，值得特别关注。在电子碰撞 [25] 和质子碰撞[23]中，这一特征通常主要由顺序解离产生。然而，在本例中，它主要源于协同解离（参见图 3）。Wang等人 [25] 将这一特征归因于经由 $^2\Pi$ 和 $^4\Pi$ 态发生的碎裂，并认为这些态中的势垒使两个 C–O 键不太可能发生对称伸缩。相反，不对称伸缩会导致顺序碎裂。在此，这一特征可能源于与 $D_2$ 解离极限相关的低能级 $^2\Pi_g$ 和 $^4\Pi_u$ 态的碎裂，也可能源于与 $D_3$ 解离极限相关的 $^2\Pi_g$ 和 $^{2,\ 4}\Pi_u$ 态的碎裂。如图 1 所示， $^2\Pi_g$、 $^2\Pi_u$ 和 $^4\Pi_u$ 态分别在 1.72、1.64 和 1.76 $^\circ$A 处存在势垒，但这些势垒低于垂直跃迁点处的能量，因此这些态也能参与协同解离。不太可能的是，对上态势能曲线上同一点的激发在一种情况下促成协同解离，而在另一种情况下却促成顺序解离。因此，在电子 [25]和质子碰撞 [23], 中，这一特征必定源自强烈倾向于顺序衰变的不同电子态。与 $D_3$ 解离极限相关的 $^2\Delta_g$ 和 $^4\Delta_g$ 态也可能对这一特征有所贡献；然而，它们分别在 1.78 $^\circ$A 和 1.58 $^\circ$A 处存在高于垂直跃迁点的势垒，因而强烈倾向于不对称伸缩，进而导致顺序解离。因此，在当前以多电子俘获为主的条件下，15.5 eV 附近的 KER 特征主要源于涉及最低三个 $^2\Pi_g$ 和 $^{2,\ 4}\Pi_u$ 态的协同解离；而在直接电离或 TI 占主导的电子和质子碰撞中，这一特征则主要源于 $^{2,\ 4}\Delta_g$ 态。

### C. 入射离子电荷和电子结构的影响

现在，我们考察顺序解离和协同解离的相对概率随入射离子电荷 $q$ 的变化。本征坐标系方法能够可靠地确定分支比，其定义为某一解离路径的 KER 分布曲线下面积与总 KER 分布曲线下面积之比。由于高能离子的收集效率有限，高动能释放区域所占比例不足，因此根据 KER 分布得到的分支比会偏向顺序事件（因为顺序事件在高动能释放区域中的贡献并不显著，

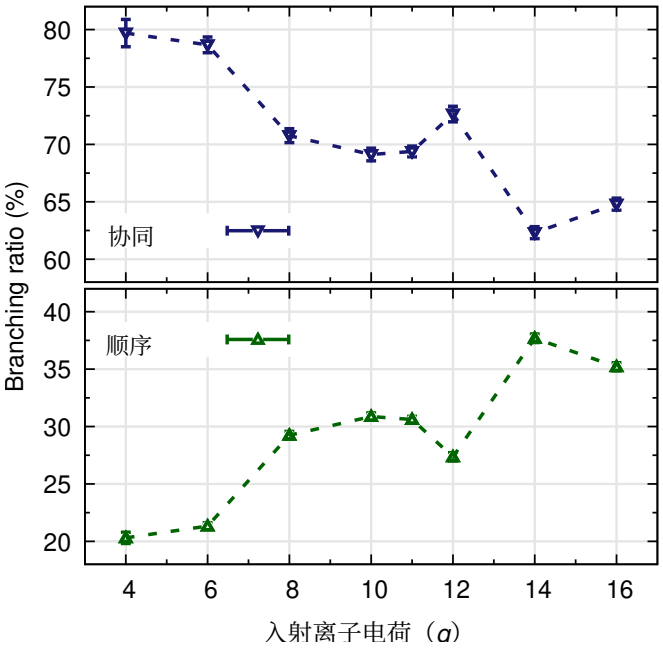


图 4. 协同解离和顺序解离的分支比随入射离子电荷 $q$ 的变化。虚线用于引导视线。实验数据的误差棒表示统计不确定度。

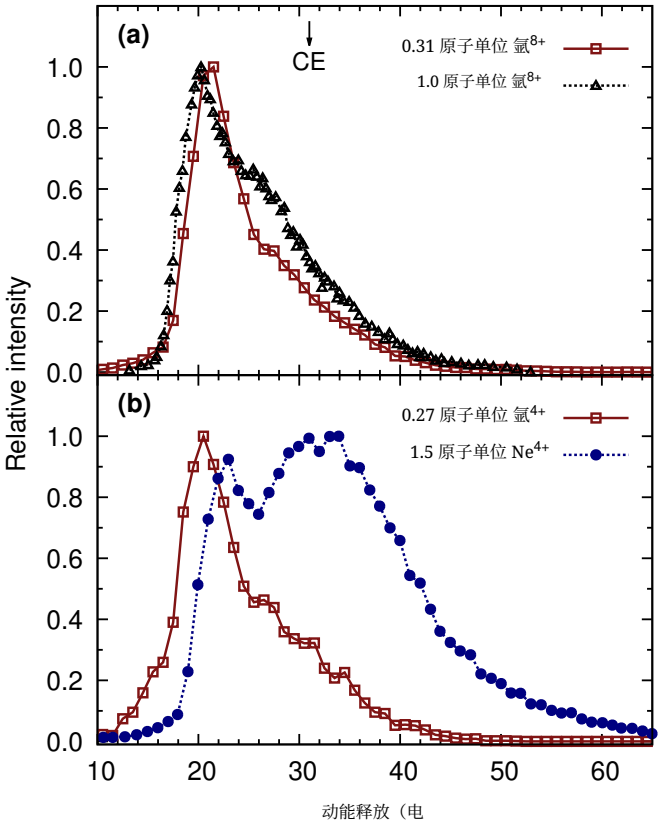


图 5. $CO_2^{3+}$ 的 $O^+$: $C^+$: $O^+$ 解离通道的动能释放分布，数据来自与 0.27 原子单位氩$^{4+}$、0 31 1 0 . 原子单位氩$^{8+}$ （本文数据）、. 原子单位氩 $^{8+}$ 入射粒子 [24] 以及 1.5 原子单位 $Ne^{4+}$ [26] 入射粒子的碰撞。每条动能释放分布均以其峰值单独归一化。箭头表示 CE模型预期的动能释放值。

）。图 $q$ 给出了两种解离路径的分支比随4的变化。在目前的 $q$范围内，分支比呈现显著变化，幅度约为 17%。总体而言，协同事件的占比随着 $q$ 增加而持续下降（而顺序事件的占比则上升）。由于顺序机制主要贡献于 KER 分布的低能区域，顺序分支比随 $q$ 逐渐上升，反映出体系越来越倾向于布居低能电子态。这一趋势总体上与经典玻尔–林德哈德 [39]以及扩展经典越垒模型（ECOB）模型的预测一致 [40]：俘获半径随 $q$ 增加而增大，因此碰撞过程逐渐变得温和。不过，氩$^{12+}$ 和氩$^{16+}$ 的情况偏离了这一总体趋势。这两个模型都忽略了入射粒子的电子结构，将其视为裸电荷。因此，值得探究具有不同电子组态但电荷相同的入射粒子会如何改变碰撞动力学。

通过比较电荷相同的两种入射粒子的 KER 分布，可以说明动力学差异。文献中已有这类数据，尽管对应的入射粒子速度不同。因此，首先比较同一种入射粒子在不同速度下的 KER 分布，并评估速度的影响，会有所助益。图 5(a) 展示了氩$^{8+}$ 入射粒子在 0.31 a.u.（本研究）和 1.0 a.u.（Khan 等人 [24]）时的 KER 分布，分别主要对应于俘获主导区域和 TI主导区域。

这两种分布存在一定差异，可归因于速度依赖性。

接下来，我们比较由两个电荷相同的入射粒子得到的 KER 分布：0.27 a.u. 氩$^{4+}$ （本工作）和 1.5 a.u. 氖$^{4+}$（Yan等人 [26]）。这些分布绘于图5(b) ，可以看到这两种等电荷射弹产生的分布截然不同。0.27 a.u. 氩$^{4+}$ 的分布在 20.5电子伏特处有一个明显峰值，而 1.5 a.u. 氖$^{4+}$ 的分布则有两个峰：一个在 22 电子伏特附近，另一个在 34 电子伏特左右（接近简单 CE模型所预期的数值）。根据图 5(a)所示数据，图5(b)中显著的差异无法用俘获与 TI 过程之间的差别来解释。值得注意的是，这两种离子具有相同的名义价电子构型（[氖]$3s^2 3p^2$ 和 [氦]$2s^2 2p^2$, , 分别），但其价电子壳层的束缚能有显著差异。因此，虽然不能忽视速度依赖性，但 0.27 a.u. 氩$^{4+}$ 与 1.5 a.u. 氖$^{4+}$碰撞之间的显著差异，在很大程度上应归因于两种入射粒子的价电子壳层束缚能不同。这一比较凸显了入射粒子的精细电子结构在决定碰撞动力学方面的关键作用，也可能解释了本研究中观察到的系统性变化偏离规律的现象。

碰撞动力学，并可能解释本研究中观察到的系统性变化偏离规律的现象。

在本研究所考察的速度范围内，采用碰撞过程的准分子图像是恰当的[12]。在此框架下，碰撞过程中会短暂形成一个瞬态（$ArCO_2$）$^{q+}$准分子复合体。随后，电子俘获可被描述为入射通道（$Ar^{q+} + CO_2$）与出射通道（$Ar + CO^{(q-3)+*} + CO_2^{3+*}$）的分子态之间的跃迁。与这些通道相关联的定域势能曲线可在某些核间距处交叉。当存在径向或转动耦合时，相应的绝热势能曲线会在这些几何构型附近呈现避免交叉。因此，电子俘获可视为避免交叉附近、与入射通道和出射通道相关联的绝热态之间的非绝热跃迁。支配这一过程的朗道–齐纳跃迁概率对多种因素十分敏感，其中包括避免交叉附近势能曲线的斜率——这一性质深受准分子组成部分电子结构的影响。

被俘获的电子占据降电荷态入射离子中的激发态，其特征由量子数 $(n_1l, n_2l', n_3l'')$ 描述，其中 $n$ 为主量子数，$l$ 为轨道角动量量子数。按 $nl$ 分辨的测量结果表明，被俘获的电子分布在一系列 $n$ 和 $l$ 值上，且概率各不相同 [41–43]。对于 $CO_2^{3+}$的任一给定激发态，可能与出射通道的势能曲线存在多个避免交叉，分别对应某些被俘获电子构型 $(n_1l, n_2l', n_3l'')$。因此，该激发态的相对布居取决于此类交叉点的数量，以及这些点附近入射通道和出射通道之间的耦合强度。

这一准分子曲线交叉框架或可定性解释 KER 分布中观察到的系统性趋势偏差。由于此处测得的 KER 分布是对所有分子取向积分所得，实验数据中靶取向相对于入射离子轨迹的影响已被平均。理论上，取向效应会使碰撞动力学变得复杂，因此，要全面描述并理解此类系统的碰撞动力学，必须开展兼顾分子取向平均和详细电子结构考量的理论研究。

## V. 结论

在与 $Ar^{q+}$ 入射粒子（$4 \leq q \leq 16$）碰撞时产生的 $CO_2^{3+}$ 的 $O^+$:$C^+$:$O^+$ 解离通道的碎裂动力学，已在 $Ar^{4+}$ 碰撞速度为 0.27 a.u.、$Ar^{q+}$碰撞速度为 0.31 a.u.（$q \geq 6$）的条件下进行了研究。利用本征坐标系分析，从总动能释放分布中分离出顺序和协同贡献。主峰位于约 20.5 电子伏特处的 KER 能谱同时来自顺序和协同解离通道，而高于 ∼25 电子伏特的高能区主要来自协同碎裂。将实验分布与从头算 势能曲线相关联，可以识别 $CO_2^{3+}$ 的贡献电子态。此前在电子和质子碰撞中观察到的一个明显低能特征，在 $Ar^{4+}$ 碰撞中表现突出，在 $Ar^{6+}$ 碰撞中则较弱；该特征归因于低能 $^2\Pi_g$、$^2\Pi_u$ 和 $^4\Pi_u$ 态的协同解离。这与在直接电离或以转移电离为主的碰撞中将其归因于顺序解离的观点不同。

对于所有入射粒子，顺序解离的 KER 分布几乎保持不变，而协同解离的分布则随入射离子电荷 $q$呈现显著但不具系统性的变化。除少数偏差外，协同解离的分支比随 $q$增加而降低，而顺序解离的分支比则随之升高。然而，经典电子俘获模型无法解释 KER 分布偏离系统性趋势的现象，也无法解释分支比偏离简单单调变化规律的现象。将文献中相似电荷态、不同速度下的数据进行比较后，可以发现 KER 分布存在显著差异：尽管速度效应显然发挥着重要作用，但仅凭速度效应无法解释 KER 能谱中观测到的差异。我们的研究结果表明，决定碰撞动力学的不仅是入射粒子的电荷态，还必须考虑其价电子壳层结构。简单的准分子框架似乎支持这一观点。要进一步理解这一问题，亟须在准分子框架内开展涉及多通道耦合的后续理论研究。

## 致谢

作者感谢印度科学与技术部、科学与工程研究委员会（印度）通过编号为 30116294 的项目慷慨资助，使 EBIS/A 离子源得以建立。他们还感谢 Dreebit GmbH 提供的技术支持，以及 IISER Pune 技术人员在设备安装和运行方面给予的协助。A. S. 感谢印度科学与工业研究委员会授予的奖学金，并感谢 Arnab Sen 博士在 GAMESS 相关工作中提供的宝贵帮助。

## 附录 A

从头算 CO 的不同电子态对应的势能曲线$^{3+}_2$已经计算得到，并与动能释放数据关联，以确定其中的贡献态。基于这些势能曲线并假设 Franck–Condon 跃迁所得到的理论模态 KER 值汇总于表 A1中。用于拟合序贯和协同 KER 分布的高斯函数的质心（见第

表 A1. $CO_2^{3+}$ 分子离子碎裂为 $O^+$: $C^+$: $O^+$ 时，不同分子电子态对应的计算模态 KER 值。对于每种电子态，均给出了三个最低解离极限对应的 KER 值：$D_1$ ($C^+(^2P) + 2\,O^+(^4S)$)、$D_2$ ($C^+(^2P) + O^+(^4S) + O^+(^2D)$) 和 $D_3$ ($C^+(^4P) + 2\,O^+(^4S)$)。上标 (L) 表示分子离子保持线性几何构型且两个碳氧键均作对称伸缩时的碎裂对应值。

| 态 | KER（电子伏特） | | |
|---|---|---|---|
| | $D_1$ | $D_2$ | $D_3$ |
| $^2\Pi_g$ | 19.1$^{(L)}$ | 15.8 | 13.9 |
| $^4\Pi_u$ | 20.1$^{(L)}$ | 16.8 | 14.9 |
| $^2\Pi_u$ | 21.1$^{(L)}$ | 17.8 | 15.9 |
| $^4\Delta_g$ | 21.5 | 18.1$^{(L)}$ | 16.3 |
| $^2\Delta_g$ | 22.1 | 18.8$^{(L)}$ | 16.9 |
| $^2\Sigma_g^+$ | 22.9$^{(L)}$ | 19.6 | 17.7 |
| $^4\Sigma_g^+$ | 23.8$^{(L)}$ | 20.4 | 18.6 |
| $^4\Pi_g$ | 23.9$^{(L)}$ | 20.6 | 18.7 |
| $^6\Pi_u$ | 28.8$^{(L)}$ | 25.5 | 23.7 |
| $^6\Delta_g$ | 29.9 | 26.6$^{(L)}$ | 24.7 |
| $^6\Sigma_g^+$ | 30.9$^{(L)}$ | 27.6 | 25.7 |
| $^6\Pi_g$ | 31.8$^{(L)}$ | 28.5 | 26.6 |
| $^8\Sigma_g^-$ | 40.0 | 36.7 | 34.8$^{(L)}$ |
| $^8\Pi_g$ | 40.8$^{(L)}$ | 37.5 | 35.6 |
| $^8\Sigma_g^+$ | 46.3$^{(L)}$ | 42.9 | 41.1 |

IV B节）以及相应的最可能电子态列于表 A2中。在指定这些电子态时，表 A1 中列出的全部三个解离极限均已纳入考虑。

[1] K. Dennerl, 《Space Science Reviews》157, 57（2010年）。[2] K. Dennerl, 《A&A》394, 1119（2002年）。[3] V. Kharchenko、A. Dalgarno、D. R. Schultz 和 P. C. Stancil, 《Geophysical Research Letters》33（2006年）。[4] M. Larsson、W. D. Geppert 和 G. Nyman, 《Reports on Progress in Physics》75, 066901（2012年）。[5] U. Amaldi 和 G. Kraft, 《Reports on Progress in Physics》68, 1861（2005年）。[6] D. Schardt、T. Els¨asser 和 D. Schulz-Ertner, 《Rev. Mod. Phys.》82, 383（2010年）。[7] J. Vancura、J. J. Perotti、J. Flidr 和 V. O. Kostroun, 《物理评论A》49, 2515（1994年）。[8] W. Wu、C. L. Cocke、J. P. Giese、F. Melchert、M. L. A. Raphaelian 和 M. St¨ockli, 《Phys. Rev. Lett.》75, 1054（1995年）。[9] E. Wells、V. Krishnamurthi、K. D. Carnes、N. G. John- son、H. D. Baxter、D. Moore、K. M. Bloom、B. M. Barnes、H. Tawara 和 I. Ben-Itzhak, 《物理评论A》72, 022726（2005年）。[10] H. Luna、W. Wolff、E. C. Montenegro、A. C. Tavares、H. J. L¨udde、G. Schenk、M. Horbatsch 和 T. Kirchner, 《物理评论A》93, 052705（2016年）。[11] R. Janev 和 H. Winter, 《Physics Reports》117, 265（1985年）。[12] M. Barat 和 P. Roncin, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》25, 2205（1992年）。[13] T. E. Cravens、I. P. Robertson 和 S. L. Snowden, 《Jour- nal of Geophysical Research: Space Physics》106, 24883（2001年）。[14] S. L. Snowden, M. R. Collier, and K. D. Kuntz, 《天体物理学杂志》610, 1182 (2004年). [15] R. C. Isler, 《等离子体物理与受控聚变》36, 171 1994( ). [16] O. P. Ford, L. Van´o, J. A. Alonso, J. Baldzuhn, M. N. A. Beurskens, C. Biedermann, S. A. Bozhenkov, G. Fuchert, B. Geiger, D. Hartmann, R. J. E. Jaspers, A. Kappa- tou, A. Langenberg, S. A. Lazerson, R. M. McDermott, P. McNeely, T. W. C. Neelis, N. A. Pablant, E. Pasch, N. Rust, R. Schroeder, E. R. Scott, H. M. Smith, T. Weg- ner, F. Kunkel, R. C. Wolf, and W.-X. Team, 《科学仪器评论》91, 023507 (2020年). [17] N. Neumann, D. Hant, L. P. H. Schmidt, J. Titze, T. Jahnke, A. Czasch, M. S. Sch¨offler, K. Kreidi, O. Jagutzki, H. Schmidt-B¨ocking, and R. D¨orner, Phys. Rev. Lett. 104, 103201 (2010年). [18] H. O. Folkerts, R. Hoekstra, and R. Morgenstern, Phys. Rev. Lett. 77, 3339 (1996年). [19] A. Khan, L. C. Tribedi, and D. Misra, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》54, 135201 (2021年). [20] B. Wales, T. Motojima, J. Matsumoto, Z. Long, W.-K. Liu, H. Shiromaru, and J. Sanderson, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》45, 045205 (2012年). [21] K. Kumar, M. A. Kalam Azad Siddiki, J. Mukherjee, H. Singh, and D. Misra, 《新物理学杂志》26, 053014 2024年( ). [22] S. Srivastav, A. Sen, D. Sharma, and B. Bapat, 《物理评论A》103, 032821 (2021年).

表 A2. 用于拟合顺序和协同 KER 分布的高斯函数质心，以及 $CO_2^{3+}$ 最可能的电子态，适用于所有入射粒子。

| 入射粒子 | 顺序 | | 协同 | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $Ar^{4+}$ | 19.5<br>$^{2,4}\Pi_g, ^4\Pi_u, ^2\Delta_g, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 15.5<br>$^2\Pi_g, ^{2,4}\Pi_u$ | 20.5<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.5<br>$^6\Pi_{g,u}, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 30.5<br>$^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 34.5<br>$^8\Sigma_g^-$ |
| $Ar^{6+}$ | 19.5<br>$^{2,4}\Pi_g, ^4\Pi_u, ^2\Delta_g, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 15.5<br>$^2\Pi_g, ^{2,4}\Pi_u$ | 20.5<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.5<br>$^6\Pi_{g,u}, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 31.0<br>$^6\Sigma_g^+, ^6\Pi_g$ | 34.5<br>$^8\Sigma_g^-$ |
| $Ar^{8+}$ | 20.5<br>$^{2,4}\Pi_u, ^4\Delta_g, ^4\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 23.5<br>$^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g, ^6\Pi_u$ | | 20.2<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.0<br>$^2\Pi_u, ^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.5<br>$^6\Pi_{g,u}, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 31.0<br>$^6\Sigma_g^+, ^6\Pi_g$ | |
| 氩$^{10+}$ | 19.7<br>$^{2,4}\Pi_g, ^4\Pi_u, ^2\Delta_g, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | | 20.5<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.0<br>$^6\Pi_{g,u}, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 31.0<br>$^6\Sigma_g^+, ^6\Pi_g$ | |
| 氩$^{11+}$ | 19.7<br>$^{2,4}\Pi_g, ^4\Pi_u, ^2\Delta_g, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | | 20.4<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.0<br>$^6\Pi_{g,u}, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 31.0<br>$^6\Sigma_g^+, ^6\Pi_g$ | |
| 氩$^{12+}$ | 19.5<br>$^{2,4}\Pi_g, ^4\Pi_u, ^2\Delta_g, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ | 22.0<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | | 20.2<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.1<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.8<br>$^6\Pi_g, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 31.0<br>$^6\Sigma_g^+, ^6\Pi_g$ | |
| 氩$^{14+}$ | 19.5<br>$^{2,4}\Pi_g, ^4\Pi_u, ^2\Delta_g, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | | 20.3<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.5<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.0<br>$^6\Pi_{g,u}, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 31.0<br>$^6\Sigma_g^+, ^6\Pi_g$ | |
| 氩$^{16+}$ | 20.1<br>$^{2,4}\Pi_g, ^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+$ | 22.7<br>$^2\Delta_g, ^2\Sigma_g^+, ^6\Pi_u$ | | 20.2<br>$^{2,4}\Pi_u, ^{2,\ 4}\Sigma_g^+, ^4\Pi_g$ | 22.4<br>$^{2,4}\Delta_g, ^2\Sigma_g^+$ | 26.5<br>$^6\Pi_{g,u}, ^6\Delta_g, ^6\Sigma_g^+$ | 31.0<br>$^6\Sigma_g^+, ^6\Pi_g$ | |

[23] S. Srivastav and B. Bapat, 《物理评论A》105, 012801 (2022). [24] A. Khan, L. C. Tribedi, and D. Misra, 《物理评论A》92, 030701 2015( ). [25] E. Wang, X. Shan, Z. Shen, M. Gong, Y. Tang, Y. Pan, K.-C. Lau, and X. Chen, 《物理评论A》91, 052711 (2015). [26] S. Yan, X. L. Zhu, P. Zhang, X. Ma, W. T. Feng, Y. Gao, S. Xu, Q. S. Zhao, S. F. Zhang, D. L. Guo, D. M. Zhao, R. T. Zhang, Z. K. Huang, H. B. Wang, and X. J. Zhang, 《物理评论A》94, 032708 (2016). [27] J. Rajput, T. Severt, B. Berry, B. Jochim, P. Feizol- lah, B. Kaderiya, M. Zohrabi, U. Ablikim, F. Ziaee, K. Raju P., D. Rolles, A. Rudenko, K. D. Carnes, B. D. Esry, and I. Ben-Itzhak, Phys. Rev. Lett. 120, 103001 (2018). [28] T. Severt, J. Rajput, B. Berry, B. Jochim, P. Feizollah, B. Kaderiya, M. Zohrabi, F. Ziaee, K. R. P., D. Rolles, A. Rudenko, K. D. Carnes, B. D. Esry, and I. Ben-Itzhak, 《物理评论A》110, 053104 (2024年). [29] S. B. Bari, R. Das, R. Tyagi, and A. H. Kelkar, 《物理评论A》112, 012818 (2025). [30] J. H. Sanderson, T. Nishide, H. Shiromaru, Y. Achiba, and N. Kobayashi, 《物理评论A》59, 4817 (1999). [31] B. Siegmann, U. Werner, H. O. Lutz, and R. Mann, Jour- nal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 35, 3755 (2002). [32] M. R. Jana, P. N. Ghosh, B. Bapat, R. K. Kushawaha, K. Saha, I. A. Prajapati, and C. P. Safvan, 《物理评论A》84, 062715 (2011).

[33] P. Bhatt、R. Singh、N. Yadav 和 R. Shanker, 《物理评论A》85，042707（2012年）。[34] B. Bapat、D. Sharma 和 S. Srivastav, 《物理学杂志：会议系列》1412，152070（2020年）。[35] W. C. Wiley 和 I. H. McLaren, 《科学仪器评论》26，1150（1955年）。[36] V. Sharma 和 B. Bapat, 《欧洲物理学杂志D：原子、分子、光学与等离子体物理》37，223（2006年）。[37] S. Srivastav 和 B. Bapat, 《科学仪器评论》93，113306（2022年）。[38] M. W. Schmidt、K. K. Baldridge、J. A. Boatz、S. T. Elbert、M. S. Gordon、J. H. Jensen、S. Koseki、N. Matsunaga、K. A. Nguyen、S. Su、T. L. Windus、M. Dupuis 和 J. A. Montgomery Jr, 《计算化学杂志》14，1347（1993年）。[39] N. Bohr 和 J. Lindhard, 《丹麦皇家科学院数学-物理学通报》28，7（1954年）。[40] A. Niehaus, 《物理学杂志B：原子与分子物理》19，2925（1986年）。[41] R. T. Zhang、X. L. Zhu、X. Y. Li、L. Liu、S. F. Zhang、W. T. Feng、D. L. Guo、Y. Gao、D. M. Zhao、J. G. Wang 和 X. Ma, 《物理评论A》95，042702（2017年）。[42] J. W. Xu、C. X. Xu、R. T. Zhang、X. L. Zhu、W. T. Feng、L. Gu、G. Y. Liang、D. L. Guo、Y. Gao、D. M. Zhao、S. F. Zhang、M. G. Su 和 X. Ma, 《天体物理学杂志增刊系列》253，13（2021年）。[43] M. A. K. A. Siddiki、M. Nrisimhamurty、K. Kumar、J. Mukherjee、L. C. Tribedi、A. Khan 和 D. Misra, 《科学仪器评论》93，113313（2022年）。