arXiv:2603.10817v1 [physics.atom-ph] 11 Mar 2026

# 二元碰撞贝特模型的部分电离截面。

**Anthony Jeseněk†、Alejandro Luque†、Nikolai Lehtinen‡**

†安达卢西亚天体物理研究所，格拉纳达，18008，西班牙
‡伯克兰空间科学中心，卑尔根大学

电子邮件：anthony.schmalzried@mailfence.com

电子邮件：aluque@iaa.es

电子邮箱：nikolai.lehtinen@uib.no

2025年7月

**摘要**。 Kim和Rudd提出的原始二元碰撞贝特模型 [48] 已被证明能够准确地解析表示电子与原子和分子碰撞时的总碰撞电离截面。该模型基于对束缚轨道中电子所产生的部分电离截面的分解。尽管该模型对总 电离具有较高的准确性，但其单独的部分电离截面所依据的阈值是理论计算得到的，而理论值系统性地高估了实验轨道束缚能。在此，我们考察基于实验电离阈值时BEB模型的性能。由此得到的各种最终（激发）离子态的分截面，有助于在等离子体物理模型中预判后续的光辐射和非辐射跃迁。

## 1. 引言

大气分子的电子碰撞电离是等离子体中的一个重要过程，此时电子的平均动能接近或高于介质组分的电离阈值。截面的解析表示是模拟碰撞电离的一种经济而高效的方法。已有许多半经验或经验公式能够准确表示总电离截面 [17, 36, 61]，Younger和Märk对其进行了综述 [93]。其中，二元碰撞贝特（BEB）模型表现出显著的结果，同时只需将占据原子或分子轨道中电子的动能 $U$ 和结合 $B$ 能作为外部输入。利用理论计算得到的 $U$ 和 $B$值，并结合实验确定的最低 电离阈值，BEB成功应用于模拟原子 [47, 48]、双原子分子 [34, 36] 以及其他大气多原子分子 [46]的总电离截面。

总电离截面 $\sigma_{\text{ion}}$ 是所有部分截面之和，这些截面来自使离子处于基态或激发态的电离过程。当

需要追踪这些激发离子，或准确模拟电离中的电子能量损失时，区分不同的部分电离通道就很重要。原则上，BEB模型已根据靶原子或分子的理论轨道结构，对这些部分过程进行了分解。然而在实际中，这些部分过程可能不能如此建模，因为它们既不反映实验阈值，也不反映由基态中性态向最终（激发）离子态跃迁所决定的实际电离过程。

本文讨论如何调整BEB模型，以模拟适用于蒙特卡罗 [12, 16, 53, 54, 73] 或动力学 [29, 70, 81]气态介质中电子群建模的部分电离过程。下一节（2）中，我们首先回顾BEB模型，并重述其基本假设，同时指出每项假设的不足。接着，在第3节中，我们从不同角度介绍BEB：不再以轨道结构为基础，而是着眼于电离通道，并阐述为何我们认为这种应用方式更为恰当。第4节将说明这一新视角的应用：我们将BEB模型用于电子对与大气研究相关的简单原子和分子气体靶发生的碰撞电离。最后，我们给出结论（5），并展望BEB模型在部分电离方面的应用。

## 2. 轨道二元碰撞贝特模型

二元碰撞贝特模型基于玻恩近似，将长程偶极相互作用与近距离二元碰撞中两个电子之间莫特截面的项结合起来。由于本文旨在表述能量至多为数百电子伏特时的分截面，为求简便，我们给出非相对论公式。对于动能为 $\varepsilon$ 的入射电子，来自一个含有 $N_j$ 个电子的轨道 $j$ 、阈值为 $I_j$ 的部分电离截面由 [49, eq.(11)] 给出：

$$\sigma_j(\varepsilon) = \frac{4\pi a_0^2 N_j}{\varepsilon + K_j}\frac{\mathrm{Ryd}^2}{I_j}\left[\frac{1}{2}\ln(\varepsilon/I_j)\left(1-\left(\frac{I_j}{\varepsilon}\right)^2\right) + 1 - \frac{I_j}{\varepsilon} - \frac{\ln(\varepsilon/I_j)}{1+\varepsilon/I_j}\right], \quad (1)$$

原子玻尔半径 $a_0 \approx 5.291\times10^{-11}$ 米 和里德伯能量 Ryd $\approx 13.602$电子伏特。除了贝特近似所依据的假设外，BEB 公式（1）还假设：

a）参数 $K_j$ 表示电离发生位置处入射电子动能的增量；b）偶极振子强度密度取决于次级电子动能 $w$，其形式简单且可解析（7） $\propto 1/(w+I_j)^2$；c）偶极振子强度的贝特和完全来自电离，即所有离散光学允许激发的贡献均计入 BEB模型 [48, $Q=1$ 假设的数值中，见第3959页 §IV 末尾。];

d） $K_j$ 和 $I_j$ 的值可根据构成中性靶分子的轨道中电子的动能 $U_j$ 和结合能 $B_j$，通过 Hartree-Fock 描述获得。

### *2.1.* 缩放参数 $K_j$

数值 $K_j$ 是一种经验缩放，用于考虑入射电子在靶的吸引势中受到的加速。由于该模型依赖玻恩近似，若不进行这种缩放，BEB模型将显著高估电离截面。因此， $K_j$ 缩放通过有效降低阈值附近能量下的截面（此时玻恩近似失效），巩固了BEB模型的成功。

与此同时， $K_j$ 正是BEB模型的阿喀琉斯之踵，因为没有通用公式能够估算 $K_j$ ，并适用于各种碰撞电离截面。因此，人们提出了若干半经验变体，以扩展BEB模型对多种靶的适用性：轻/重原子 [28], 价层/芯层轨道 [72, 公式（6–7）], 中性/电离靶 [48, §VI。]或原子/分子 [46]。我们仅介绍以下两种半经验近似：

**Burgess分母：** 由 Vriens [89] 提出，考虑到被 $B_j$ 束缚的轨道电子具有与其平均平方动量相对应的动能 $U_j \equiv \langle p_j^2/2m_e \rangle$ 。

$$K_j = (U_j + B_j)/n_j \ . \tag{2}$$

动能项 $U_j$ 是在二体相遇模型中对束缚电子的取向取平均时产生的。后来，Huo 和 Kim [35, §III.B:p.1234] 在公式中除以主量子数 $n_j$ ，以修正重原子核外层壳层的电离（$n_j \geq 3$），适用于原子靶 []。

**屏蔽修正：** 由 Guerra 等人 [28] 提出，用以取代 Santos 等人针对内壳层电离对 BEB 缩放所作的初步修改 [72,公式（6）]。他们的新公式如下：

$$K_j = 2\mathrm{Ryd}\left(a\frac{Z_{\mathrm{eff},n\ell j}}{2n^2} + b\frac{Z_{\mathrm{eff},n'\ell' j}}{2n'^2}\right) \ . \tag{3}$$

有效核电荷 $Z_{\mathrm{eff}}$ 根据 Clementi 和 Raimondi [13] 的数据得到：$Z_{\mathrm{eff},\ 1s} = 0.9834Z - 0.1947$，$Z_{\mathrm{eff},\ 2s} = 0.7558Z - 1.1724$ 以及$Z_{\mathrm{eff},\ n\ell j} = Z - \sum_{i=1}^{n-1} 2\ (i-1)$ ，否则取该值。完全屏蔽是当前亚壳层（$n\ell$）与下一个已占据亚壳层（$n'\ell'$，能量更高）的有效屏蔽的线性组合（设为 $a = 0.3$ 和 $b = 0.7$ ）。请注意，对于价亚壳层，模型设定为： $n'\ell' = n\ell$。此外，对于分子，主量子数 $n$ 并非合适的量子数，只能用于内层（非价）轨道。

这两个表达式都试图估算电离发生位置处入射电子的动能 $K_j$ 。显然，这种经典的电离观

点存在局限；由于占主导地位的偶极相互作用是长程作用，因此无法“定位”入射电子。尽管如此，从形式上说，BEB模型依赖于第一玻恩近似（平面波近似）。众所周知，该近似总会高估相互作用，因为它没有考虑靶的势对入射电子波造成的畸变。因此，$K_j$ 从形式上看，动能可视为入射电子能量的一种有效修正，用以反映其在整个相互作用过程中受到势的影响而产生的畸变（包括与束缚电子的关联）。有关这种缩放的进一步讨论，可参见 Tanaka 等人。 [85, §B.1.a]及其中的参考文献。

由于上述两种缩放的目的互为补充，在第4 节中，我们将对价电子壳层采用式（2），对内层 $1s$ 壳层（无论是原子还是分子）采用式（3），用于以下研究。无论如何，对 $K_j$的估算——无论是像式（2）那样基于二元碰撞近似，还是像式（3）那样基于屏蔽估算——均不受电离阈值 $I_j$ 在式（1）括号项中的影响。

### *2.2.* 偶极振子强度

关于偶极振子强度密度总和的假设 c) 需要更详细的解释。在非弹性碰撞的贝特理论中，积分电子激发截面和电离截面的渐近表达式均与一个称为偶极振子强度的量成正比，记作 $f$[39, 式（4.18）、（4.29）]:

$$\sigma_{\mathrm{exc},j} \sim \frac{f_{\mathrm{exc},j}\mathrm{Ryd}}{W_j}\frac{\ln\varepsilon}{\varepsilon} + O(\frac{1}{\varepsilon}) \,, \tag{4}$$

$$\sigma_{\mathrm{ion},j} \sim M^2_{\mathrm{ion},i}\frac{\ln\varepsilon}{\varepsilon} + O(\frac{1}{\varepsilon}) \,. \tag{5}$$

标签 $j, i$ 只是分别用于标记不同离散激发和电离通道的索引。量 $W_j$ 是索引为 $j$的电子激发的能量阈值。对于这些电子激发，若$f_{\mathrm{exc},j} > 0$ ，则称为（光学或偶极）允许；其余则为禁阻 ，并且它们随入射电子动能 $\varepsilon$ 变化的渐近行为衰减得更快（$\sim 1/\varepsilon$ 或更陡）。

量 $M^2_{\mathrm{ion},i}$ （称为“偶极矩阵元平方”）是对来自电离通道 $i$的次级电子动能 $w$ 积分所得的量，使用微分 （或密度）偶极振子强度 [85, 式（19c）]得到:

$$M_i^2 = \int_0^\infty \frac{\mathrm{Ryd}}{w + I_i}\frac{\mathrm{d}f_{\mathrm{ion},i}}{\mathrm{d}w}\mathrm{d}w \,. \tag{6}$$

除了贝特近似外，BEB 的上述假设 b) 还为偶极振子强度密度规定了一个分布形式，如 [48, 式（46）]:

$$\frac{\mathrm{d}f_{\mathrm{ion},i}}{\mathrm{d}w} = \frac{N_i I_i}{(w + I_i)^2} \,, \tag{7}$$

其中 $N_i$ 是振子密度的积分值。那么，在 BEB 中，数值$M^2_{\text{ion},\ i}$ 等于 $N_i$里德伯 $/2I_i$ [48, 式（49）]。

偶极振子强度（及其积分）均受一个称为托马斯-库恩-贝特求和规则的方程联系和约束，其数值等于靶（原子或分子）束缚电子的总数 $N$ 式(16) [85, ]:

$$\sum_j f_{\text{exc},j} + \sum_i \underbrace{\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}f_{\text{ion},i}}{\mathrm{d}w}\mathrm{d}w}_{\equiv N_i} = N\ . \tag{8}$$

最后，BEB 关于托马斯-库恩-贝特求和的假设 c) 是令 $\sum_i N_i = N$ [48, 式(49)中的 $Q = 1$]，从而$\sum_j f_{\text{exc},\ j} = 0$。

当然，实际情况并非如此，因此原则上这意味着 BEB 渐近地会高估总电离截面，因为它涵盖了所有光学允许激发；无论这些激发是否确实导致靶电离（例如自电离）。由此我们注意到，BEB 隐式地 包含了光学允许的自电离（通过其偶极振子强度的贡献，而该贡献会影响渐近区域）。

尽管如此，如果我们查阅已应用BEB的各种靶标，我们并未观察到任何渐近高估。事实上，青色曲线见于图4 下方，其所重现的原始总电离BEB截面总体上与实验数据吻合良好。吻合最好的例子是氮、一氧化碳、氮$_2$,氧$_2$, 一氧化碳$_2$ 和一氧化氮$_2$。

从渐近角度看，数百电子伏特处的数值不应受到缩放 $K_j$ 的影响；对于所选靶标，该缩放在来自价电子壳层的电离中保持为 $\lesssim$100 电子伏特，而价电子壳层电离占了总截面的大部分。因此，我们推测这种出乎意料的良好一致性源于最后一项假设，即对靶的Hartree-Fock建模。

### *2.3. Hartree-Fock*轨道

BEB的总电离截面由各“轨道”截面之和构成：

$$\sigma_{\text{tot}}(\varepsilon) = \sum_{j=1}^{n_{\text{orb}}} \sigma_j(\varepsilon)\,, \tag{9}$$

这一称谓由原作者提出，因为这些 $\sigma_j$ （1）基于哈特里-福克方法中原子或分子的理论轨道结构，其中每个电子被束缚于其轨道 $j$ 以理论束缚能$B_j$。此外，仅将最低束缚能替换为其实验值，从而使总截面具有与实验一致的阈值 [36, p.2966]。

这种对 $\sigma_{\text{tot}}$的分解是人为的，因此不能用于估算各个轨道的电离子过程。正如Hwang等人在结论中明确指出的那样， [36, 第2966]:

[BEB模型] 可用于计算——总电离截面，而非轨道截面——

造成这种不足有两个原因：

（i）Hartree-Fock 模型存在局限性，未能准确纳入束缚电子之间的关联力。因此，结合能的 Hartree-Fock 值 $B_j$ 可能与实验测量值存在显著差异$I_j$ [19, 表 1]。这一点被用来指出 Hartree–Fock近似和分子轨道理论在预测分子轨道结合能排序方面的一些不足 [例如对于氮$_2$： 10]。

（ii）将电离建模为从占据轨道中移除一个电子，依赖于所谓的广义库普曼或“冻结轨道”近似。广义库普曼斯 [51] 近似指出，由单个斯莱特行列式描述的Hartree–Fock原子/分子中一个电子的束缚能 $B$ 等于该原子/分子移除该电子的电离阈值 $I$ 。通常，单个斯莱特行列式不足以恰当描述原子或分子态。但库普曼斯近似所引入的最大误差在于，它将电子的移除描绘为其他电子轨道保持“冻结”；也就是说，它们不会因一个束缚电子的消失而弛豫 [79, §5:p.53]。

简言之，Hartree-Fock近似和Koopmans近似无法准确描述束缚电子之间的相关性。经过考察，我们发现，采用这些近似理论计算得到的轨道束缚能通常高于实验电离阈值： $B_j \gtrsim I_j$。因此，使用理论 $B_j$ 计算得到的BEB总截面，大致按比例低于使用实验 $I_j$ 得到的结果（因为式 1 $\propto 1/I_j$中的幅度因子如此）。此外，Koopmans近似忽略了部分电离过程的一个重要方面：从某个特定轨道移除电子，实际上会开启多个电离通道，而每个通道都有不同的电离阈值。

本文提出将BEB（见表1分解为与特定电离通道相关的截面，这些通道采用实验电离势值 $I$ ，这些值由光电子能谱测定 [79]。下一节将介绍这类电离通道。

## 3. 电离通道

从上述讨论可知，BEB依赖Koopmans近似存在局限，因为电离至激发离子态并非仅仅对应于从占据轨道中移除一个电子。要准确模拟电离过程的内在复杂性是一项非常艰巨的任务。理想情况下，应力求完整描述光电离谱中所有可辨识的过程——因此也包括参与主导偶极

电子碰撞电离的项。不过，BEB等半经验模型已被证明能够以简单而相当准确的方式表示总电离截面。我们在此主张部分激发离子态的电离应在BEB模型中参照电离峰进行建模，或者更一般地说，应依据光电离光谱学实验观测到的显著特征进行建模 [80]。如此一来，BEB模型的应用就不必局限于那些低能阳离子态能够通过从由Hartree-Fock轨道构成的基态组态中移除单个电子来充分描述的靶标。

一般来说，电离会扰动离子的轨道结构，可分为以下三种情况：

a) 耦合：对于开壳层靶，从闭合亚壳层电离会使轨道与自旋角动量和开壳层中的电子产生不同的耦合可能性。例如，从碳原子的 $2s$轨道电离可能形成$^4P$、 $^2D$、 $^2S$ 或 $^2P$离子态 $C^+$。另一个例子见图 1 上方的图：不同笔画样式的暖色（橙色、黄色、棕色）线条表示原子氧电离后形成的状态（$^4S^o$、 $^2D^o$、 $^2P^o$），此时一个 (2p) 电子被移除。1。

b) 重新分配：其中一些状态（双重态）可能只有在开亚壳层（$2p$）中的轨道电子随后重新分配后才能形成。氮的亚稳单重态$^+{}^1D$和 $^1S$也是很好的例子；这些状态要求电离后 $2p$ 轨道中剩余的两个电子之一翻转其自旋投影。电子自旋的改变很可能是与入射电子 [78, p11] 发生交换所致（而非自旋翻转相互作用）。

c) 摇跃：在高入射电子能量下，除了从轨道中击出一个电子外，价电子壳层中的其他电子也可能被激发到其他轨道。在X射线光电子发射中，这称为“摇跃” [79,p.26]。被“摇跃”后的离子态例如氮$_2^+$的B $^2\Sigma_u^+$态和C $^2\Sigma_u^+$态，它们是移除一个 $2\sigma_u$ 电子与将一个电子激发至 $1\pi_g$ 轨道 [60]所形成的组态混合。

光电子能谱与电子碰撞电离之间的联系，是通过贝特理论中的偶极振子强度建立起来的。因此，我们预期，光电离谱中显著峰所对应的态，在碰撞电离截面中也会有重要贡献。反之，较弱的特征仍可忽略。下文将讨论如何调整BEB模型，以考虑上述各方面。

**离子态多重度**。在轻原子中，Russell-Saunders $LS$ 耦合导致的能级简并破缺非常微弱。因此，Kim and Desclaux [47] 提出，对于来自同一价亚壳层的电离至激发离子态，其相对贡献应按离子态的统计多重度加权。对于标记为 $^{2S+1}L$ 的态（例如 $O^+$ $^4P$

与 $S = 3/2$ 和 $L = 1$）其多重度 $m_p$ 由（$2S + 1$）（$2L + 1$）给出。这些统计权重基于这样一种组合：在入射电子能量远高于相应部分电离阈值时（远离共振和耦合），初始态可视为简并态；并且只考虑相互作用程度相同的离子激发（偶极允许、禁自旋等）。 [67, p。12]因此，参数 $N$ 成为通道中电子的“参与”权重（而非占据轨道上的电子数）。对于分子， $N$ 也按各最终离子态的多重度进行加权。本文末尾的表1 列出了我们计算的各种电离通道的 $N$ 取值。

**自旋禁戒电离通道**。 在计算参与权重 $N$ 时，还必须谨慎考虑电离是否涉及电子自旋翻转。占据轨道中的电子自旋发生变化而伴随的电离事件，类似于光学自旋禁戒激发，只是同时伴有非束缚连续态中电子的发射。由于其微分振子强度分布应为零，因此它们不参与托马斯-库恩-赖希-贝特求和规则。这意味着此类电离通道不会在光电子能谱中显现，因此，我们可以预期，此类电离事件的截面与光学允许通道相比很小。

Wang等人的精确 B 样条 $R$-矩阵计算 [91]表明，从氮 $^4S$ 到氮$^+$ $^1D$ 和 $^1S$ 的自旋禁戒电离对总电离的贡献不到1%。鉴于自旋禁戒激发的渐近衰减呈 $\sim 1/\varepsilon^3$ [39, p.341:leftcolumn], 我们预计自旋禁戒电离也会有类似的快速衰减。在 BEB模型中，这一微小贡献可能仅来自高阶项（衰减快于偶极振子强度的高阶项），对应于方程 5。鉴于这类事件极少发生，我们将忽略其对总电离的贡献。我们将在第 4.1 节评估原子的 BEB 时进一步讨论这一情况。

**垂直电离阈值**。此外，如果靶是一个分子，其键长和分子形状在电离后可能会发生显著变化。一个典型例子是二氧化氮（$NO_2$），它在移除其单重态（$6a_1$）电子后，会转变为线性$^1\Sigma_g^+$平衡几何构型 [5, p。452] ，因为它与等电子的一氧化碳$_2$ 分子相同。因此，分子电离还会诱发振动跃迁；对此，我们必须区分绝热能量阈值与垂直（峰值）能量阈值，正如 Siegbahn等人所解释的那样。 [79, p。55]在本文中，遵循Kim 等的结论， [46], 我们始终使用垂直电离阈值。

**自电离**。对于共振，BEB模型实际上计入了由导致自电离的偶极允许激发所产生的振子强度，因此它们的贡献被默认包含在内（见第2.2节）。这是因为BEB是在假定振子强度的托马斯-库恩-贝特求和

完全归因于电离[48]。至于来自偶极禁戒激发态的自电离（因而在光电子能谱中并不出现），随着入射电子能量的增大，其衰减比来自偶极允许态的衰减陡峭得多；因此它们的总体贡献仅限于一个很小的共振区域。

**分支比。** 电离过程的复杂性也意味着，生成特定离子物种并非只有一种途径。除直接电离外，离子也可以通过自电离生成。多重激发离子可通过摇落（与多个电子相互作用）形成，也可在内层电离后通过俄歇发射形成（对于轻原子，这种情况比X射线退激发更常见[80]）。然而，生成多价离子的实验截面在远低于一个 $1s$ 电子束缚能的阈值处就开始出现，而且显著大于K壳层电离截面（图2）。因此，多重电离机制主要归因于超出单一二体相遇模型及其后续自电离的复杂电子-离子相互作用。在分子中，双电离几乎总会导致“库仑爆炸”，使高能原子离子向相反方向飞散 [7, 第155页–157]。由于分子电离至激发态后可能发生多种过程，因此需要分支比来估算特定电离通道产生离子碎片的概率。其他研究已进行过这类工作 [34] ，本文不再赘述。

鉴于对 BEB 模型与电离过程进行的对应分析，下一节将把从光电离谱中确定的实验阈值作为输入参数应用于 BEB 模型，并对结果进行评论。

## 4. 应用

现在，我们将 BEB 模型拆分为来自价电子壳层和内层轨道的部分电离通道，并将其应用于四种轻原子：碳、氮、氧、氟；四种双原子分子：一氧化碳、$N_2$, $O_2$, 一氧化氮；以及四种三原子分子：$CO_2$, $H_2O$、$NO_2$ 和 $O_3$；这些物质都与大气气体中的冷等离子体研究相关。表1 汇总了已识别的过程，并列出：

- $I$ ：通过光电子能谱测得的相应实验电离势；
- $K$ ：使用以下方法计算缩放因子：– 式（2），针对价层轨道，使用实验电离阈值作为“结合能”（$B = I$）和动能 $U$ ，动能取自 Kim and Desclaux[47] （C、N、O 原子）、Hwang等人 [36] （双原子分子）、Kim 等 [46] （三原子分子），以及 Koga 等人的轨道波函数 [50] （氟）；– 式（3），针对核心 $1s$层；

- $N$：根据上述最终离子态（$2L+1$）（$2S+1$）的多重度规则以及相应轨道中的电子占据，确定电子在各通道中的参与情况。自旋禁阻反应的贡献（为完整起见列出，并用带斜线的箭头 $\nrightarrow$ 标注）被认为可以忽略。

最后一列给出了从中提取电离通道及其阈值的参考文献。

包含所有已识别部分电离通道的BEB模型如图1所示，分别针对原子（氧）、双原子（一氧化氮）和三原子（氧$_3$）气态靶。每条线对应于（a.）从某一轨道（在 Hartree-Fock 图像中）射出一个电子，或对应于（b.）一个电离通道（在更一般的图像中）。由同一轨道电离产生的不同分截面以不同线型（实线、虚线.....）表示。较浅的颜色用于外层壳层/较小的结合能。我们可以观察到离子多重度对所预测部分电离截面的影响，因而不同多重度组之间在量级上出现分离，正如一氧化氮的三重态与单重态离子激发所示（中图）。

为便于查看，图 2单独展示了 1s（K）壳层的部分电离；其中，按照不同分子中略有差异的 1s 结合能，将来自碳、氮和氧原子的电离堆叠显示。差异最大的是甲烷（$CH_4$）中与碳原子结合的 1s 电子；Tawara 等人 [86]的实验研究采用了甲烷。这些实验数据以 X 射线产生截面的形式报告，需使用荧光产额 $\omega_{1s}$ 将其换算为碰撞电离截面。关于这一点，请注意，Santos 等人 [72, 图1]中展示的氮的实验 K 壳层截面低于 Llovet 等人[59, 图 11：第46]页采用 EADL 报告的荧光产额 [66]。为避免歧义，我们在图 2的图注中注明了所用的荧光产额 $\omega_{1s}$ 。

鉴于原始 BEB模型用于内层壳层电离时存在不足，Santos 等人 [72, 式（6）] 提出通过对缩放因子进行经验平均来修正该模型，其结果以灰色实线曲线表示。总体而言， $K$通过屏蔽式（3）估算的结果比 Santos 等人的经验平均结果符合得更好。 [72, 图 1–2]。对于氧，符合程度略差，这与用于将 X 射线产额转换为截面的荧光因子取值有关，仍存在争议。此外，我们认为阈值附近能量处的偏差源于实验结果精度的降低，因为这些结果在光电子能谱确定的电离阈值以下能量处仍给出了非零值。因此，我们主张将 BEB模型与 [86] 作为参数一同使用，并像我们在表1中所做的那样列出其数值，而不是依赖基于其他参数（例如束缚电子的动能）的半经验公式。 $U$ 。要为 $K$找到一个通用的解析公式将颇具挑战性。$K$ 从头算则是可行的，例如可根据平面波近似与畸变波近似所得截面之比的平均值进行计算。

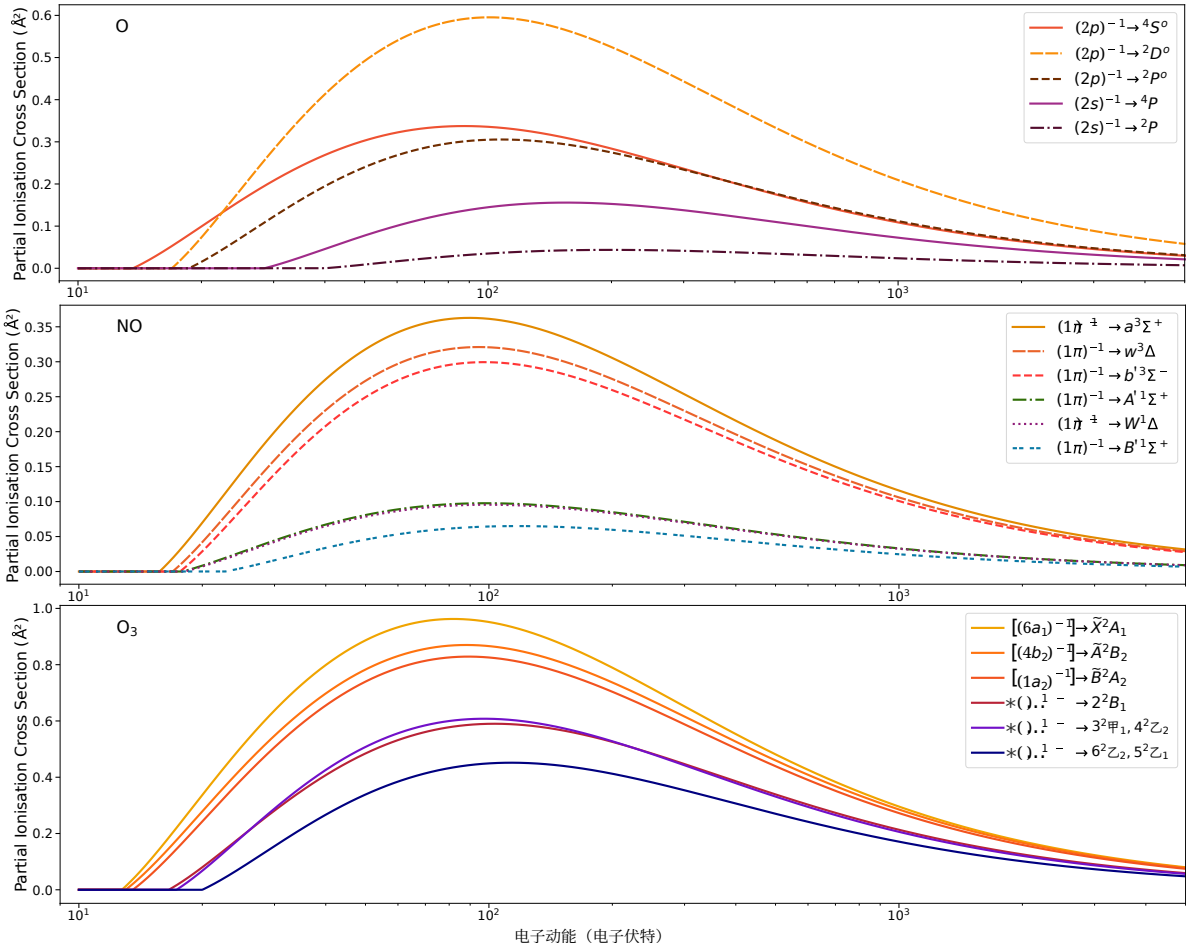



**图1**。 使用 BEB模型计算得到的原子氧（上）、一氧化氮（中）和臭氧（下）的部分电离截面，参数见表 1。较浅的颜色表示外层轨道（结合能较低）。不同线型区分了从同一轨道移除电子但产生不同离子结果的电离。未配对电子的角动量耦合会形成不同的离子态，其多重度反映了它们的强度，如原子氧中的情况以及一氧化氮中的三重态和单重态。轨道图像不适用于臭氧。尽管前三个离子态仍可对应于从具有主导构型 [（方括号内）], 的轨道中逸出电子，但从更深层价轨道发生的电离（*）只能对应于最终离子态；这些离子态的多个振动带在光电子能谱的某一区域内相互重叠，并被归为一组，形成下方图中绘制的“部分”碰撞电离截面。

与基于 Hartree-Fock 结合能的原始 BEB模型进行比较时，必须回溯到从轨道图像中移除电子的过程，并将源自同一轨道的所有电离通道相加。在图3中可以清楚看到，对于选定的三个靶标（氮、氧$_2$ 和一氧化碳$_2$），所有理论结合能都高估了实验值（虚线的阈值均高于同色实线的阈值）。直接结果是，与我们新近

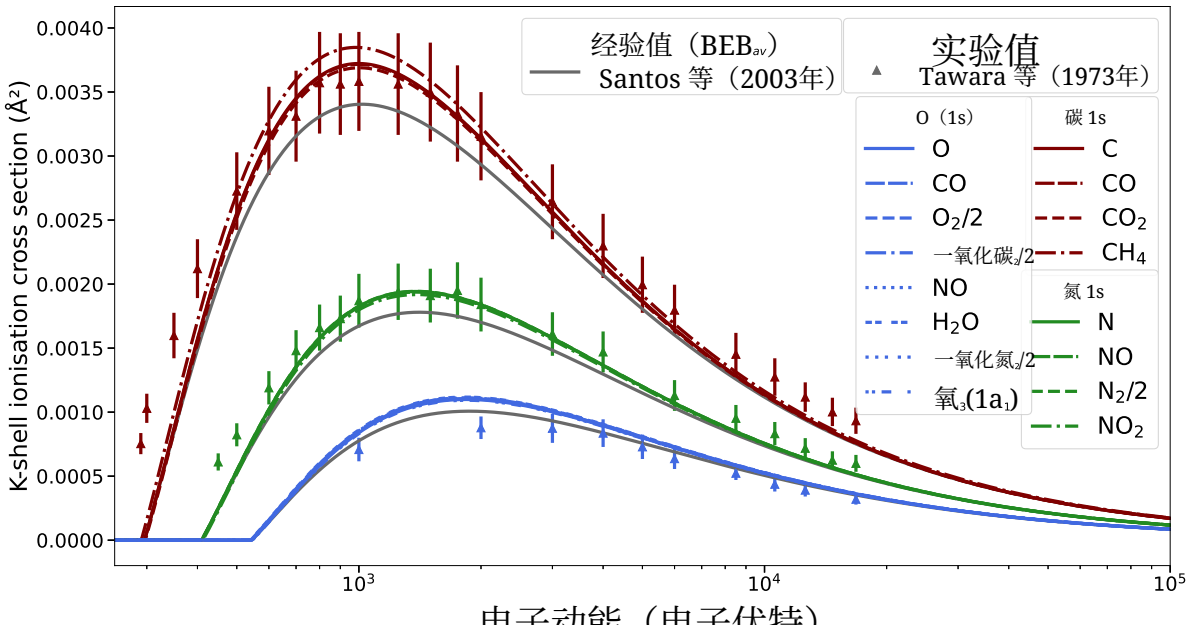



**图2.** 自由态及与各种分子结合态的 C、N 和 O 原子 1s 壳层的部分电离截面。各气态元素的 1s结合能 $I$ 列于表 1 的首行。标度能 $K$ 根据公式（3）计算。用于转换实验数据的荧光因子取自 Tawara等人 [86]: $\omega_{C_{1s}} = 2.47 \times 10^{-3}$ [37, 表 I]、$\omega_{N_{1s}} = 4.35 \times 10^{-3}$、$\omega_{O_{1s}} = 6.91 \times 10^{-3}$[58] （说明请见正文）。

计算所得值。

最后，将所有分截面（如图 1 所示）求和得到的总电离截面（红色实线），与图 4 中的实验总电离截面进行比较。BEB 模型在重现总电离截面方面的成功，已在一系列论文中得到充分证实 [36, 46–48]。然而，yon计算（以青色实线重现）依赖于理论Hartree-Fock轨道束缚能，而这些能量与电离至激发态的实验阈值不符。当前图 4 表明，对于某些靶标，使用实验测定的电离阈值仍能保持良好的一致性。对于其他靶标，BEB模型则无法准确描述总电离截面，这意味着需要进一步缩放。

下面，我们对所考虑的各个靶标得到的电离总截面和分截面加以评述。根据文献中的现有信息，我们说明如何识别各个离子态，以及这些离子态是否可视为带有空穴的纯态或混合态。

### *4.1.* 原子

总体而言，BEB分截面之和与原子靶实验数据的一致性良好，氟除外。在图的左栏4 我们

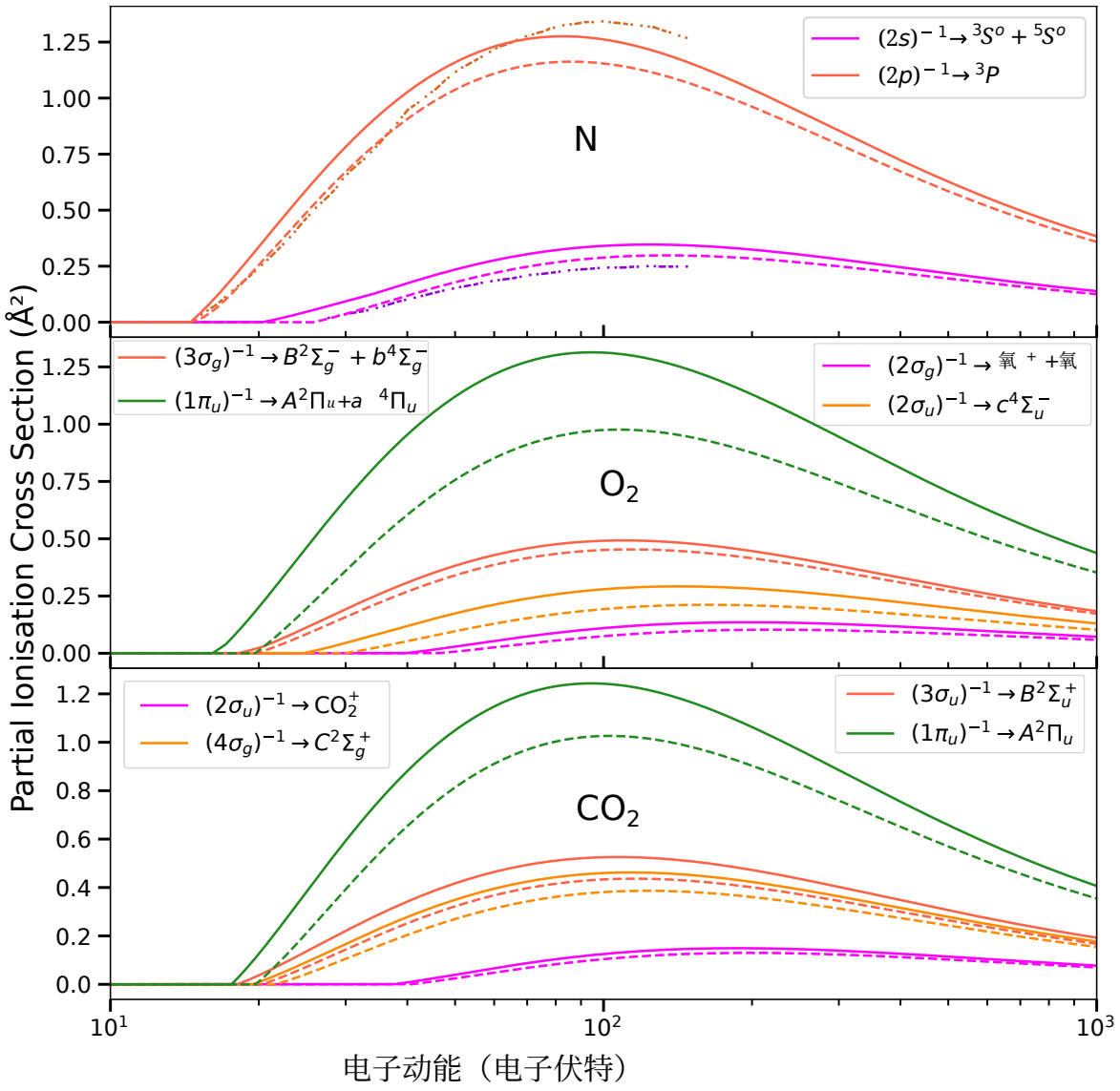



**图3**。 使用BEB模型获得的原子氮（上）、分子氧（中）和二氧化碳（下）的“轨道”电离截面。实线（—）表示与从分子轨道移除电子相关的电离通道的分截面之和，其参数见表1。相同颜色的虚线（---）对应于使用哈特里-福克计算得到的理论阈值的原始BEB模型。断线（· · —）表示Wang等人对氮进行的BSR计算。 [91, 图 7]。较高电离阈值直接意味着大致成比例降低的截面，这一点可由公式（1）看出。这一差异也会保留在图4的总电离截面中。

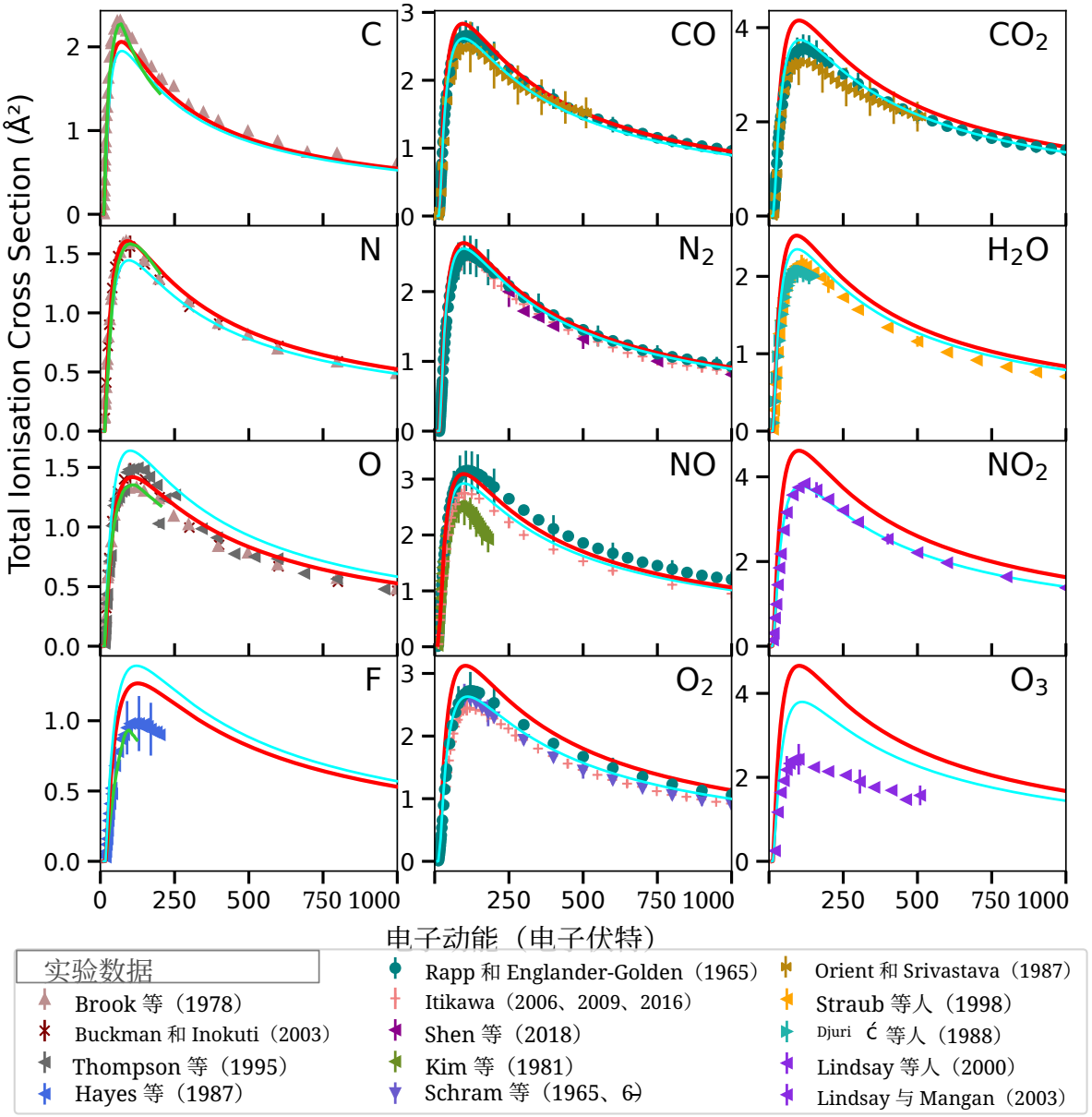



**图4**。采用实验电离阈值的 BEB 模型部分电离截面之和 $I$ （表1）以红色实线（—）表示，原始 Hartree-Fock 理论结合能以青色（—）表示；将这些结果与四种原子、四种双原子分子和四种三原子分子的实验测得总电离截面进行比较。对于原子靶（左列），浅绿色（—）表示 BSR 计算，数据来自 [26, 87, 90, 91]。实验数据来自 [2, 8, 18, 25, 30, 38, 40–42、45、56、57、64、65、68、69、74–76, 83, 88]。来源标签的排列与 4×3 网格相呼应，不过有些来源提供了许多不同靶标的数据。

还以浅绿色显示 Zatsarinny 和 Bartschat 的 BSR计算 [94] 。值得一提的是，在 Brook等人的实验测量值中， [8],亚稳激发原子进入了碰撞室。不过，我们绘图所用的数据是扣除了这些亚稳态外推信号后的校正后的截面（这些亚稳态的电离阈值低于基态）。因此，我们无法排除部分差异也可能源于实验推导的截面存在误差。

*C.* Kim and Desclaux 首次采用 BEB模型进行模拟时， [47, 图 1] 认为，BEB电离截面的不足可以通过纳入自电离的贡献来弥补。虽然我们确实认为这一假设可能正确，但我们认为，在加入自电离之前，首先应从BEB模型中扣除可归因于自电离的振子强度部分。事实上，单独计算的自电离（ai）截面的渐近形式符合$\sigma_{\rm ai} \sim f_{\rm ai} \ln \varepsilon/\varepsilon$。然后，根据第2.2节的讨论，BEB的偶极部分应按$(N - f_{\rm ai})/N$进行缩放。

实际上，这意味着将 BEB 模型替换为所谓的“BE$Q$”模型，其中 $Q$ 参数起到（归一化）贝特和的作用。这会降低相应的 BE$Q$截面，但由于我们新计算出的截面（图4中的红色实线）高于先前采用的 BEB 截面，因此通过 $Q$进行缩放，便可能使两条曲线（红色实线和青色线）吻合，并保留 Kim and Desclaux [47, 图 1]中呈现的一致性。尽管如此，Wang等人 [90, 第6页左栏] 认为，这种一致性只是偶然的，因为用于自电离态的振子强度被高估了。对此应开展更详细的研究，纳入偶极振子强度加以验证；但这超出了本研究的范围（本研究仅限于纯 BEB 模型）。

对于 K 壳层的部分电离（图2），我们采用了 Bruch等人表 IV 中报告的 $26^{\rm th}$ 谱线的实验数据 [9] ，并补充了 NIST数据库 ≈11.26 报告的电离势（C I≈11.26 电子伏特 和 C II≈24.383电子伏特）。Guerra等人 [52]、Santos 等人[28], 从同一来源提取了他们的数据，但我们缺乏有关束缚能数值如何得出的信息。

氮。 情况与碳类似；更新阈值会提高 BEB总截面。这使人对先前的结论产生怀疑，即 Brook等人的 修正后的实验数据 [8, 表 5] 仍然受到 30% 的氮 $^2D$ 问题困扰，正如 Kim and Desclaux [47, 图 3]所示。我们有两个有力的理由可以证明事实并非如此：

i. Brook等人的实验数据 [8, 表 5] 已经 计入了亚稳态粒子产生的伪信号。根据他们测得的截面（“$Q_m$”），他们利用通过简单幂律“常数/$\epsilon$”外推得到的“表观”截面 $Q_a^*$，扣除了亚稳态的电离贡献，从而得到“真实的”

截面 $Q$ （列于其表格中间一栏）。虽然无法确定这种估算有多粗略，但在与实验数据比较时，Kim and Desclaux [47] 本应使用测得的截面 $Q_m$ ，而非校正后的截面，来验证他们关于亚稳态混合物的论点（仔细查看他们的图后，我们认为他们似乎使用了调整后的数值 $Q$（$E$） ，见 [8, 表 5]）。

ii. Kim and Desclaux 的原始截面 [47] （青色，图4）偏低，因为他们将总电离按统计权重分配给两个自旋禁戒电离通道，即：（$2p$）$^{-1} \rightarrow$ 氮$^{+1}$ $S$（18.59 电子伏特）和（$2p$）$^{-1} \rightarrow$ 氮$^{+1}$ $D$（16.43 电子伏特），其能量高于基态通道的电离能（14.53 电子伏特）。随后，Wang等人的B样条计算 [91] 发现上述自旋禁戒电离通道的贡献可以忽略不计（$>$ 1%）。因此，他们得到的2p轨道电离截面比我们的结果更大。

图3 上方图中给出了BEB模型下2p和2s轨道电离通道的比较，其中还用破折线绘出了Wang等人的BSR计算结果 [91, 图 7]。

**(2p)$^{-1}$：** 在不超过 50 电子伏特的能量范围内，BSR结果更接近采用原始阈值的BEB结果（其中对禁阻态进行了统计加权），但之后，即使采用更新后的阈值，BSR计算结果仍高于BEB模型。假设BSR计算准确，这意味着BEB需要修订其缩放（$K$），如方程（2所示，因为它仅在接近阈值的能量范围内有效。

**(2s)$^{-1}$：** BSR的阈值与我们在N$^{+}$（$2s2p^3$）$^3S^o$ 中发现的阈值不同，后者在20.34电子伏特，与NIST数据库 [52]相符。因此，与BSR相比，BEB截面更高。要理解阈值为何不一致，还需要进一步澄清。

与此同时，我们进一步扩展Wang等人对BEB结果的批评，指出该模型需要修订所采用的阈值和开放的电离通道。

*O.* 对于氧，我们无法复现 Kim and Desclaux 给出的原始 BEB[47] ，因为他们没有公布用于生成两个亚稳氧离子 O$^{+}$ $^2D^o$ 和 O$^{+}$ $^2P^o$的阈值。使用我们的阈值时，我们得到图 4中的红色实线；它在渐近区域已经高估了截面，而且在低于 100电子伏特时的低估程度也不像 [47, 图 4]中观察到的那么明显。再说一次，我们并不否认原子氧有多个自电离通道；但如果要分别计入这些通道，就必须根据这些自电离过程所占的偶极振子强度份额，对 BEB 进行缩放（理由与碳相同）。从 Tayal and Zatsarinny 的 BSR计算中数字化得到的结果 [87] 很好地复现了 Brook等人的测量数据 [8]。作者认为，BEB 与 BSR 的差异源于自电离激发的建模方式。

*F.* 对于氟，截面被高估是因为电离通道的光学振子强度过大。贝特和总量中有 12% 被离散激发占据 [26, 表 II]。采用更精确的偶极振子强度模型可以得到更好的结果 [8, 48, §3.2，图 9]。尽管氟似乎超出了 BEB模型的适用范围，但 Gedeon等人的 BSR计算 [26] 与 Hayes等人的实验数据吻合良好 [30]。

### *4.2.* 双原子分子

除氧$_2$, 外，原始和修订版BEB在总电离截面上的差异很小，但阈值可能相差10%。对于下文讨论的每种分子，我们都会探讨根据轨道结构识别出的各种电离通道，以及电离后发生解离的可能性。在可能的情况下，我们会介绍根据经典光电离截面得出的分子离子的解离分支比和预解离信息。一般而言，双电离完整分子（其产率也取决于寿命）的产量虽非零，但与解离成离子碎片相比可以忽略不计 [56, p.5-20,63]。

氮$_2$。 这两种闭壳层等电子分子是氮$_2$ 和一氧化碳。若从移除分子轨道中的电子这一角度来看，它们是最容易描述的；不过，氮$_2$ 的B态和C态并非纯态，而是不同的组态混合，其中含有一个激发的 $2p\pi$ 电子 [60, 表 1]。C态会从振动态$v' \geq 3$ [23]发生预解离。移除一个 $2\sigma_g$ 电子最有可能导致解离，生成氮+氮$^+$；而芯轨道中的空穴会引发俄歇发射，随后分离为氮$^+$+氮$^+$ [7,p.216]。将Straub等人 [82] 给出的氮$^+$ 碎片部分电离截面进行比较，会发现目前理论预测尚未计入相当一部分氮$^+$ 的贡献。这部分可能来自碰撞后相互作用：从 $2\sigma_u$ 轨道发射出的次级电子能量足以将氮离子激发至其8.7电子伏特的解离极限以上，正如光电子能谱所示 [79, p.64]。

一氧化碳。目前，一氧化碳是唯一一种我们为其保持电离通道与分子轨道电子逸出之间一一对应关系的双原子分子（见表1）。因此，图4上方红色曲线从青色曲线中分离出来，是因为重新评估了较高电离阈值；此前对这些阈值的高估幅度约为 10%。

尽管如此，在 $B^2\,\Sigma^+$ 态（射出 $4\sigma$ 电子）以上，激发离子结构变得更加复杂，并且存在许多会预解离为 $C^+$+O 碎片的弱束缚态 [7, p.229]。这些态无法像本文所示那样，简单地用束缚轨道结构进行建模。移除一个 $3\sigma$ 电子后所产生的解离路径细节仍有待讨论。假设电离内层轨道后，生成的原子碳离子和氧离子产率大致相等。

一氧化氮。 由于只有一个 $2\pi$ 电子，一氧化氮具有最多样化的激发离子态。移除一个 $1\pi$ 电子后，因其与孤对 $2\pi$电子存在不同的耦合可能性，可形成六种态（三种单重态和三种三重态） [32, 表 I]。这种单重态与三重态的区分，可从图 1中间图所示分截面上的两组橙色曲线看出。最高能级 B’$^1\Sigma^+$ 单重态的标记仍需确认 [33, p.482]。

一氧化氮是一个很好的例子，说明当 Hartree-Fock 计算得到的轨道束缚能（ 18.49 eV [36, 表 1]）$1\pi$处于更复杂的电离通道划分的中间位置（$\in$ [15.73； 22.73] eV）时，如图4所示，原始（青色）与修订后的（红色）BEB 总电离截面之间的差异仍小于一氧化碳；尽管与一氧化碳相比，一氧化氮原始与修订后建模方式之间的定性差异更大。

具有 $1\pi$ 轨道空穴的不同态的能量范围与具有 $5\sigma$ 轨道空穴的态重叠。因此，根据文献中给出的一氧化氮电子组态，这些轨道（$5\sigma$ 和 $1\pi$）按其“束缚”能量排列的顺序可能不同（例如，比较 Berkowitz [7], Hwang等人 [36, 第231页，表 I]与 Huber [32]）。由于某些$(1\pi)^{-1}$ 和$(5\sigma)^{-1}$ 态的振动带重叠，因此可以将它们务实地归为具有共同束缚能的一组，但其相对贡献不同 [21]。

接下来，由移除一个 $4\sigma$ 电子产生的两个较高离子态 $c$ 和 $B$ 实际上被怀疑是与 $(2\pi)^2$ 组态 [55]的混合态。无论如何，它们主要预解离为氮$^+$ + 氧 [7, 第236]页。此外，也有迹象表明，移除一个 $3\sigma$ 电子同样有利于氮$^+$ + 氧解离 [7, 第237], 页，尽管我们不知道这些态是排斥态，还是弱束缚态并发生预解离。

氧$_2$。 分子氧具有部分占据的 $1\pi_g$ 轨道，因此，来自内亚壳层的电离既可以产生四重态，也可以产生双重态 [7, 第219]页。 $1\pi_u$ 和 $3\sigma_g$ 轨道能量在Hartree-Fock 模型中的不当排序 [36, 表 1]是相应电离阈值被显著高估的原因（图3中间图中的绿色实线和虚线），并解释了原始和修订版BEB之间总电离截面的主要差异。

氧的预解离始于 $v' \geq 4$ b 的$^4\Sigma_g^+$，但程度较弱。对于 B 态，这种预解离会增强，而 c$^4\Sigma_u^-$ 可认为会完全预解离[7, p。222]。从芯轨道电离会导致俄歇发射和解离；而移除一个 $2\sigma_g$ 电子，则可能形成能级非常高的（束缚）双重态，也可能形成会解离的（排斥）四重态。此外，还存在一系列源自更复杂组态的激发离子态。

### *4.3.* 三原子分子

总体而言，三原子分子的总电离截面高估程度比双原子分子更严重（对于后者，修订后的 BEB 模型仍能给出相当合理的

估算结果）。

一氧化碳[2]。 二氧化碳是唯一的线性三原子分子，其他分子（在基态下）都属于 $C_{2v}$ 对称点群 [参见 31，§4.3。2]。Aresta 等人对二氧化碳的性质和电子结构作了很好的总结。 [3, §1。2]。与一氧化碳类似，原始和修订版 BEB 的差异源于此前对较高电离阈值高估了 10% 以上，这一点可从图 3底部的曲线中看出。

~在最初的离子能级中，似乎只有 C态会发生预解离。内层$3\sigma_g$ 和 $2\sigma_u$ 轨道的能量非常接近，分别是 O(2s)+C(2s) 和 O(2s)+C($2p_z$) 的混合态 [1, p.146:table 5]。从这些内层轨道电离，似乎主要会导致 $C^+ + 2O$ 解离 [7, p.255]。移除一个 $4\sigma_g$ 会形成 $\tilde{C}$ 态，该态主要预解离为 $O^+(^4S) + CO(^1\Sigma)$；而较高的振动态可能预解离为 $CO^+(^2\Sigma^+)$+O($^3$P)，$CO^+$:$O^+$ 的比例约为 1:3 [7, p.253–4]。

$H_2O$. 水是此处介绍的具有 $C_{2v}$ 对称性的最简单分子。适用于这种对称性的分子态和轨道命名法可参阅 Hertel和Schulz [31, §4.3.3:p.257–9:table 4.2–3]。由于水的振动光谱复杂，从每个轨道电离水都会产生丰富的振动带，其中包含间距很近的窄峰 [44, p.4746:fig.1]。移除一个（$1b_2$）O–H 成键电子后，$H_2O^+$ 离子便开始解离。相对于 $H_2O^+$，碎裂截面约为 $OH^+$:$H_2O^+$ 的 $\lesssim$0.5，以及 $H^+$:$H_2O^+$ [7, 的 ∼0.12，见 p.244]。移除一个（$2a_1$）电子会导致完全解离，$H^+$:$O^+$ 的比例为 3:1 [84]。最后，逸出一个（$1a_1$）电子会引发快速的俄歇衰变，随后发生库仑爆炸，可能生成 $2H^+ + O^+$ [7, ，见 p.246]。

一氧化氮[2]。 一氧化氮电离通道对应的轨道对称性[2] 见表1 ，遵循 Baltzer 等人的记法 [5， 第 451] 页。其记法与 [46,~ 表 II] 中的记法以及能级的排列顺序也有所不同。图 4 中原始和修订版BEB的总电离截面存在显著差异，主要是由于与 $5a_1$，$1b_1$ 和 $3b_2$ 轨道相关的电离通道所致；这些轨道的 Hartree-Fock 能量实际上比实验值高出约 18%，此外，其他阈值也被高估了 10%。尽管结合能存在这一不足，原始BEB与总电离截面仍吻合得令人惊叹。我们认为这种吻合纯属巧合。

与一氧化氮类似，二氧化氮的最外层价电子壳层中有一个孤电子（$6a_1$）。移除这个孤电子后，$NO_2^+X$ 呈线性结构，并与一氧化碳等电子[2]。这种显著的几何构型变化引发了极其密集而丰富的振动光谱，其绝热电离阈值可能低至 9.6电子伏特 [14]。然而，电离起始能量可视为从振动峰质心附近开始，约为11.2电子伏特 [5, 图 5]。从最高占据分子轨道以下的所有轨道电离

轨道可产生三重态或单重态。不过，来自深于 $4b_2$ 和 $1a_2$ 轨道空穴的这种能级分裂，在光电子能谱中并不可见 [5, 第454页：图 1]，因此我们将分裂态归为一组。尽管大多数主要高电离态仍符合单电子空穴图像，多组态计算表明，某些态（如 $(1b_1)^{-1}\,{}^3B_1$）源于显著的组态相互作用 [11, 第584页：表 1]。内价层轨道的结合能取自 Baltzer 等人的光电子能谱中宽峰的位置 [5, 第455页：表 2]。

$NO_2$ 较低的解离阈能（≈2.78电子伏特）[2] 使所有激发电离态的解离分支比都很高，主要碎裂为 $NO^+ + O$ [77,p.687:§IV]。$NO^+$ 的相对产额在约 20 电子伏特时达到峰值，约为 75% [4, 图 5]，而且似乎会随着能量升高缓慢稳定在约 50% [62, p.37:图 5]。不过，研究发现态特异性分支比存在显著差异 [22, p.146–7]。$O^+$ 离子的主要来源似乎是 $(3b_2)^{-1}$ 态 [22, p.146:§3.7]。这里需要指出，虽然预解离分支比同样适用于通过光电离或电子碰撞形成的离子物种，但不能保证这种碎片比的类比也同样适用于导致直接解离的电离通道。

$O_3$。臭氧是目前介绍的最复杂分子，也是唯一一个其基态可能无法由单一 Hartree-Fock 组态准确描述的分子。它涉及 $[\ldots](1a_2)^2(4b_2)^2(6a_1)^2(2b_1)^0$ 和 $[\ldots](1a_2)^0(4b_2)^2(6a_1)^2(2b_1)^2$组态的混合 [92, §1]。因此，表1中报道的 $O_3$ 的所有电离过程（核心 1s 轨道除外）都不能解释为轨道中简单的空穴，而是源于更复杂的组态相互作用（因此使用虚线箭头）。不过，为保持一致性，对于前三个离子态，我们按照 [92, 表 3] 中的报道写出了主导构型。$O_2^+$ 的产生起始能量为 13.2 电子伏特，这与 $(1a_2)^{-1}\,\tilde{B}\,{}^2A_2$ 态 [63, 图2：插图] 相吻合，据认为该态会发生预解离。所有更高的离子态主要解离为 $O_2^+ + O$。高于 $\tilde{B}\,{}^2A_2$, 的态涉及从更深层的 $5a_1$, $1b_1$ 和 $3b_2$ 轨道激发，具有非主导混合组态，其振动带彼此重叠，因此可以将它们的贡献合并处理。在表1中，我们选取了 Couto 等人报道的能带 (5)、(6) 和（合并后的 7、8、9）的垂直能量 [15, 表 I]。然而，关于离子对称性的归属缺乏充分文献依据，所引用的参考文献实际上并未讨论这些能带。因此，我们将这些标注置于方括号中。臭氧光电离中高于 26 电子伏特的区域更加模糊，因为我们找不到任何涉及 $(3a_1)$、$(2b_2)$ 和 $(4a_1)$ 内层轨道的信息。为完整起见，我们采用了 Kim 等报道的理论值[46, 表 II]。尽管从臭氧中模拟部分电子碰撞电离存在诸多不确定性，但最后一张图（图4）中所见的总电子碰撞电离截面与实验值之间特别差的吻合度，部分原因应在于实验数据不够准确；这些数据确实给出了异常低的截面（与其他三原子分子相比）。Kim 等人将此归因于不准确的

Newson 等人的实验数据归一化 [64]。据我们所知，迄今为止，这一差异尚未得到解决。

臭氧对基于分子轨道分解的BEB模型提出了挑战，如图底部图中的虚线标签所示 1。由于电子-空穴图像在较高激发的氧$_3^+$ 态中失效，参数 $N$的归属也变得不确定。这表明需要一个更为广义的BEB模型，该模型并非基于轨道的占据数 $N$ （以及离子态多重度），而是基于在每个能带区域上积分的（微分）偶极振子强度。电离截面仍可分解为若干具有不同阈值的部分截面，但参数 $K$， $N$ 以及这些截面的标注必须重新加以考虑。

## 5. 结论与展望

我们评估了二元碰撞贝特模型用于计算电子碰撞部分电离截面的适用性。我们确定，其主要局限源于它被构造为若干“轨道”截面之和，这些截面反映了单组态 Hartree-Fock 模型的结构，而该模型总体上对所考虑的许多分子描述较差。这一局限在将理论部分电离阈值与光电子能谱中观测到的实验阈值进行比较时表现得很明显：前者系统性地高估了后者。

我们认为，为了获得方程（9）中电离通道的分截面，应使用光电子能谱实验数据确定所有电离阈值，以确保结果一致。遗憾的是，这会降低 BEB 模型对分子靶总电离截面的整体描述性能。事实上，对于所有分子，采用 Hartree-Fock 模型理论计算的结合能的原始 BEB 模型，比采用实验测得的电离阈值时更符合实验数据。

尽管如此，这一观察揭示了误差的偶然抵消如何促成了简单 BEB 模型的成功。这一点在此前关于原子靶的 B样条 R 矩阵研究系列中 [26, 87, 90, 91] 已有论述。这一观察改变了此前关于 BEB 模型性能的结论。我们希望澄清以下几点：

I. 对于原子靶， 自旋禁戒电离（见带横线的箭头 $\nrightarrow$ ，表1）的贡献可以忽略。这影响了关于实验数据中原子氮亚稳态所占比例的前提。II. 所有自电离态对总电离截面的贡献，已经包含在BEB模型中，因为该模型假定贝特和（偶极振子强度）全部用于电离过程。若要单独模拟自电离过程，就需要从BEB模型中一致地扣除被自电离过程占用的那部分偶极振子强度

（此时它不再是BEB，而是变成带有 $Q < 1$的BE$Q$ 模型）。这一误解影响了原子碳和氧的结果。

III. 较高的电离阈值会导致分截面成反比减小，主要影响BEB的渐近尾部。这解释了为何许多已知具有重要光学允许激发（并不导致电离）的分子（氧$_2$，一氧化氮$_2$，一氧化碳$_2$），即使在渐近区域也能被BEB出人意料地良好建模。通常，人们会预期出现与尚未减去的那部分贝特和成比例的高估，正如我们目前所遇到的情况。

二元碰撞贝特模型高估总电离的总体趋势其实并非未知，并可通过降低包含在某一参数中的光学振子强度来加以修正 $Q$ 用于BE$Q$ Kim和Rudd的模型 [48]。在作者的学位论文 [73, §11.5.4], 我们能够准确拟合 $Q$ 以再现大气气体的总电离截面。然而，我们并未使用此处所确定的部分电离阈值。在本文中，我们希望提醒读者警惕简单半经验模型的偶然成功。只有在使用实验值$I$ 之后，拟合才会 $Q$ 为用二元碰撞贝特模型表示分截面开辟一条有前景的途径。考虑到这些问题，我们提出：

(i) 理论轨道结合能 $B$ 应替换为垂直电离阈值 $I$，即在光电子能谱中识别为尖锐峰峰值或宽带质心对应的能量。(ii) BEB模型在总电离截面的渐近区间内的高估，如今可用于识别更准确的BE$Q$模型所计入的贝特和（光学振子强度）带来的缩放。(iii) 贝特缩放参数 $K$ 应取决于所考虑的过程，也可以（但不一定）与式 2 中Burgess分母所用的轨道结合能 $B$ 和动能$U$ 有关。事实上，Hwang等人[36, 等2966]建议使用者将 $U$ (因此 $K$) 视为可调参数。例如，采用Guerra等人的式 3 （式(1)）[28, ，对1s壳层的部分电离（见图 2）进行建模效果更好。此外， $K$ 参数可以调整，使BE$Q$ 模型与100电子伏特附近峰区的实验数据相吻合。

最后，由于目前没有电子碰撞电离部分电离截面的直接测量数据，因此，进一步应用BEB模型模拟部分电离过程，将不得不依赖三种主要的间接比较来源：

1) 总电离截面：若要进一步改进，需要纳入光电子能谱中针对所考虑的每个跃迁、按带区积分的微分偶极振子强度信息，并据此采用 BE$Q$模型，而非 BEB（如 Schmalzried [73, §11.5.4]）。

2) 部分电离截面：使用基于先进的 从头算 模型（例如 B样条R矩阵）发表的预测 [94]来评估 BE$Q$分截面。

3) 碎裂电离截面：为分子靶直接电离后发生的过程（预解离、自电离和辐射退激）（离子碎片的产生）构建模型或采用分支比的平均值 [34]

致谢

作者感谢审稿人提出的宝贵评审意见，以及关于如何改进本文重点的建议。四位不同的审稿人给予了我们帮助，我们相信他们的批评促成了一项非常富有成果的研究。我们感谢西班牙科学、创新与大学部研究事务国家局通过授予安达卢西亚天体物理研究所“Severo Ochoa卓越中心”奖（SEV-2023-0709）提供的资金支持，同时感谢挪威研究理事会根据合同208028/F50、216872/F50和223252/F50（卓越中心）提供的资助。N. Lehtinen获得了挪威研究理事会根据合同335162/L40提供的支持。

本研究收集的所有数据均可通过以下途径免费获取：`elmolcs`Python 包托管于 Codeberg，现也已在 PyPI 上发布。用于生成所有图表和表格的 Python 文件（`BEB.py`）作为补充材料提供。

表1：方程 1 中 BEB模型的输入参数。被确定为部分电离阈值的轨道中的电子束缚能（$I$）、动能标度能（$K$），以及轨道占据数或参与部分电离的程度（$N$）。带横线箭头标记的过程（$\not\rightarrow$）为光学自旋禁戒过程（需要电子交换）。虚线箭头（$\dashrightarrow$）表示最终态不一定表现为亚壳层中的空穴，而更可能是混合态。带问号的箭头（$\overset{?}{\rightarrow}$）表示该过程后续有多个分支比。星号（*）表示存在预解离。最后一列列出了所标识过程及所采用数值的参考文献。分子轨道的命名法见 Hertel和Schulz [31, §4.3:第253页–259]

| 亚壳层或<br>反应 | $I$<br>(eV) | $K$<br>(eV) | $N$ | 参考文献 |
|---|---|---|---|---|
| $(1s)^{-1}$ ? →碳$^{++}$ + e$^-$ | 296.24 | 160 | 2 | [9,表 IV：行 26] |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ 碳$^+$ $^2P$ | 24.98 | 66.9 | 2/3 | [52] |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 碳$^{+\,2}S$ | 23.22 | 65.1 | – | |
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 碳$^{+\,2}D$ | 20.55 | 62.5 | – | |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ 碳$^{+\,4}P$ | 16.59 | 58.5 | 4/3 | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ 碳$^{+\,2}P$ | 11.26 | 45.4 | 2 | |
| $(1s)^{-1} \overset{?}{\rightarrow}$ 氮$^{++}$ +e$^-$ | 409.64 | 223 | 2 | [71] |
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 氮$^{+\,1}P^o$ | 35.22 | 100.9 | – | [52] |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ 氮$^{+\,3}S^o$ | 33.78 | 99.4 | 3/4 | |
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 氮$^{+\,1}D^o$ | 31.42 | 97.1 | – | |
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 氮$^{+\,3}P^o$ | 28.08 | 93.7 | – | |
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 氮$^{+\,3}D^o$ | 25.97 | 91.6 | – | |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ 氮$^{+\,5}S^o$ | 20.34 | 86.0 | 5/4 | |
| $(2p)^{-1} \nrightarrow$ 氮$^{+\,1}S$ | 18.59 | 69.6 | – | |
| $(2p)^{-1} \nrightarrow$ 氮$^{+\,1}D$ | 16.43 | 67.5 | – | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ 氮$^{+\,3}P$ | 14.55 | 65.6 | 3 | |
| $(1s)^{-1} \overset{?}{\rightarrow}$ 氧$^{++}$ +e$^-$ | 544.54 | 297 | 2 | [24, 27, §4.1] |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ 氧$^{+\,2}P$ | 39.98 | 124.7 | 2/3 | [52] |
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 氧$^{+\,2}S$ | 37.88 | 122.6 | – | |
| $(2s)^{-1} \nrightarrow$ 氧$^{+\,2}D$ | 34.20 | 119.0 | – | |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ 氧$^{+\,4}P$ | 28.50 | 113.3 | 4/3 | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ 氧$^{+\,2}P^o$ | 18.64 | 87.1 | 6/5 | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ 氧$^{+\,2}D^o$ | 16.94 | 85.4 | 2 | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ 氧$^{+\,4}S^o$ | 13.62 | 82.8 | 4/5 | |
| $(1s)^{-1} \overset{?}{\rightarrow}$ F$^{++}$ +e$^-$ | 696.7 | 381.3 | 2 | [43, 第466]页 |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ F$^{+\,1}P^o$ | 47.12 | 158.6 | 0.5 | [52] |
| $(2s)^{-1} \rightarrow$ F$^{+\,3}P^o$ | 37.89 | 149.4 | 1.5 | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ F$^{+\,1}S$ | 22.99 | 113.9 | 1/3 | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ F$^{+\,1}D$ | 20.01 | 110.9 | 5/3 | |
| $(2p)^{-1} \rightarrow$ F$^{+\,3}P$ | 17.42 | 108.3 | 3 | |
| $(1\sigma)^{-1} \overset{?}{\rightarrow}$ 碳$^{++}$，氧$^{++}$，碳$^+$ + 氧$^+$ | 542.57 | 297 | 2 | [33, 第170] |
| $(2\sigma)^{-1} \overset{?}{\rightarrow}$ 碳$^{++}$，氧$^{++}$，碳$^+$ + 氧$^+$ | 296.24 | 160 | 2 | |
| $(3\sigma)^{-1} \overset{?}{\rightarrow}$ 碳$^+$ +氧 | 38.9 | 120.4 | 2 | |
| $(4\sigma)^{-1} \rightarrow$ 一氧化碳$^+$ B $^2\Sigma^+$ | 19.7 | 92.9 | 2 | |
| $(1\pi)^{-1} \rightarrow$ 一氧化碳$^+$ A $^2\Pi$ | 16.58 | 70.9 | 4 | |
| $(5\sigma)^{-1} \rightarrow$ 一氧化碳$^+$ X $^2\Sigma^+$ | 14.01 | 56.3 | 2 | |
| $(1\sigma)^{-1} \overset{?}{\rightarrow}$ 氮$_2^{++}$，氮$^+$ + 氮$^+$ | 409.5 | 223 | 4 | [33, p.426] |
| $(2\sigma_g)^{-1} \rightarrow$ 氮 +氮$^+$ | 37.8 | 108.9 | 2 | |
| $(2\sigma_u)^{-1} \dashrightarrow$ 氮$_2^+$ 碳 $^2\Sigma_u^+$* | 23.6 | 86.8 | 1 | |
| $(2\sigma_u)^{-1} \dashrightarrow$ 氮$_2^+$ B $^2\Sigma_u^+$ | 18.75 | 81.9 | 1 | |
| $(1\pi_u)^{-1} \rightarrow$ 氮$_2^+$ A $^2\Pi_u$ | 16.72 | 61.0 | 4 | |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $(3\sigma_g)^{-1} \rightarrow$ 氮$_2^+$ X $^2\Sigma_g^+$ | 15.58 | 70.5 | 2 | |
| $(1\sigma)^{-1}$ ?→ 氮$^+$ +氧$^+$，氮$^{++}$，氧$^{++}$ | 543.2 | 297 | 2 | [33, 页482] |
| $(2\sigma)^{-1}$ ?→ 氮$^+$ +氧$^+$，氮$^{++}$，氧$^{++}$ | 410.2 | 223 | 2 | |
| $(3\sigma)^{-1}$ ?→ 氮$^+$ +氧 | 40.56 | 117.1 | 2 | |
| $(4\sigma)^{-1}$ --→ 一氧化氮$^+$ c $^3\Pi$，B $^1\Pi$* | 21.72 | 98.8 | 2 | [21] |
| $(5\sigma)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$ A $^1\Pi$ | 18.37 | 80.6 | 0.5 | |
| $(5\sigma)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$ b $^3\Pi$ | 16.6 | 78.9 | 1.5 | |
| $(1\pi)^{-1}$ ? → 一氧化氮$^+$ B′ $^1\Sigma^+$ | 22.73 | 78.1 | 1/3 | |
| $(1\pi)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$ W $^1\Delta$ | 18.12 | 73.5 | 1/3 | |
| $(1\pi)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$A′ $^1\Sigma^+$ | 17.88 | 73.3 | 1/3 | |
| $(1\pi)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$ b′ $^3\Sigma^-$ | 17.65 | 73.0 | 1 | |
| $(1\pi)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$ w $^3\Delta$ | 16.93 | 72.3 | 1 | |
| $(1\pi)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$ a $^3\Sigma^+$ | 15.73 | 71.1 | 1 | |
| $(2\pi)^{-1} \rightarrow$ 一氧化氮$^+$ X $^1\Sigma^+$ | 9.26 | 74.5 | 1 | |
| $(1\sigma)^{-1}$ ?→ 氧$_2^+$，氧$_2^{++}$，氧 +氧$^+$ | 543.1 | 297 | 4 | [33, 第504] |
| $(2\sigma_g)^{-1}$ ?→ 氧$_2^+$ ,氧 + 氧$^+$ | 39.57 | 79.73 | 2 | |
| $(2\sigma_u)^{-1} \rightarrow$ 氧$_2^+$ 碳 $^4\Sigma_u^-$* | 24.58 | 90.92 | 2 | [7, 第 222–5] 页 |
| $(3\sigma_g)^{-1} \rightarrow$ 氧$_2^+$ B $^2\Sigma_g^-$* | 20.3 | 71.84 | 2/3 | [20] |
| $(3\sigma_g)^{-1} \rightarrow$ 氧$_2^+$ b $^4\Sigma_g^-$* | 18.17 | 71.84 | 4/3 | |
| $(1\pi_u)^{-1} \rightarrow$ 氧$_2^+$ A $^2\Pi_u$ | 17.15 | 59.89 | 4/3 | |
| $(1\pi_u)^{-1} \rightarrow$ 氧$_2^+$ a $^4\Pi_u$ | 16.16 | 59.89 | 8/3 | |
| $(1\pi_g)^{-1} \rightarrow$ 氧$_2^+$ X $^2\Pi_g$ | 12.07 | 84.88 | 2 | |
| $(1\sigma)^{-1}$ ?→ 碳$^+$2 + 氧$^+$ | 541.1 | 297 | 4 | [1, 表 6：第147] |
| $(2\sigma_g)^{-1}$ ? → 碳$^+$2 + 氧$^+$ | 297.5 | 160 | 2 | |
| $(2\sigma_u)^{-1}$ ?→ 碳$^+$ + 2氧 | 39.7 | 115.4 | 2 | [3] |
| $(3\sigma_g)^{-1}$ ?→ 碳$^+$ + 2氧 | 37.5 | 115.9 | 2 | |
| $(4\sigma_g)^{-1} \rightarrow$一氧化碳$_2^+$ ~ | 19.4 | 94.7 | 2 | |
| $(3\sigma_u)^{-1} \rightarrow$一氧化碳$_2^+$ B $^2\Sigma_u^+$ 碳 $^2\Sigma_u^+$* | 18.1 | 89.7 | 2 | |
| $(1\pi_u)^{-1} \rightarrow$一氧化碳$_2^+$ ~个 $^2\Pi_u$ | 17.6 | 67.6 | 4 | |
| $(1\pi_g)^{-1} \rightarrow$ 一氧化碳$_2^+$ X $^2\Pi_g$ | 13.8 | 78.2 | 4 | |
| $(1a_1)^{-1}$ ?→ 2氢$^+$ +氧$^+$ | 539.70 | 297 | 2 | [79, 第84页：表5.3。1] |
| $(2a_1)^{-1}$ ?→ H$^+$ +H + 氧 | 32.20 | 102.9 | 2 | |
| $(1b_2)^{-1} \rightarrow$ 氢$_2$氧$^+$ $^2$硼$_2$ | 18.51 | 66.87 | 2 | [7, 第241页：表格 5] |
| $(3a_1)^{-1} \rightarrow$ H$_2$氧$^+$ $^2$A$_1$ | 14.74 | 74.27 | 2 | |
| $(1b_1)^{-1} \rightarrow$ 氢$_2$氧$^+$ $^2$硼$_1$ | 12.62 | 74.52 | 2 | |
| $(1a_1)^{-1}$ ? → 氮 + 2氧$^+$ | 541.3 | 297 | 4 | [79,第126页：表格 5.4.4] |
| $(2a_1)^{-1}$ ? → 氮$^+$ +氧$^+$ +氧 | 412.4 | 223 | 2 | [79,第123页：表5.4。3] |
| $(3a_1)^{-1}$ ? → 一氧化氮$^+$ +氧 | 38.9 | 112 | 2 | [5, 表 2] |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $(2b_2)^{-1}$ ?→ 一氧化氮$^+$ +氧 | 32.0 | 110 | 2 | |
| $(4a_1)^{-1}$ ?→ 一氧化氮$^+$ +氧 | 21.3 | 100 | 2 | |
| $(3b_2)^{-1}$ ?→ 一氧化氮 +氧$^+$ | 19.06 | 75.8 | 2 | |
| $(1b_1)^{-1}$ --→ 一氧化氮$_2^+$ d $^3B_1$* | 17.63 | 90.9 | 2 | |
| $(5a_1)^{-1}$ → 一氧化氮$_2^+$ 碳 $^3A_1$* | 17.45 | 69 | 2 | |
| $(4b_2)^{-1}$ → 一氧化氮$_2^+$ B $^1B_2$* | 14.60 | 83.7 | 0.5 | |
| $(1a_2)^{-1}$ → 一氧化氮$_2^+$ A $^1A_2$* | 14.13 | 83.2 | 0.5 | |
| $(1a_2)^{-1}$ → 一氧化氮$_2^+$ b $^3A_2$* | 13.69 | 78.9 | 1.5 | |
| $(4b_2)^{-1}$ → 一氧化氮$_2^+$ a $^3B_2$* | 13.06 | 78.3 | 1.5 | |
| $(6a_1)^{-1}$ → 一氧化氮$_2^+$ X $^1\Sigma_g^+$ | 11.2 | 87.4 | 1 | |
| $(1a_1)^{-1}$ ? → 2氧$^+$ +氧 | 546.20 | 297 | 2 | [6] |
| $(2a_1)^{-1}$, $(1b_2)^{-1}$ ? → 2氧$^+$ +氧 | 541.50 | 297 | 4 | |
| $[(3a_1)^{-1}]$ $\overset{?}{\dashrightarrow}$ 氧$_2^+$ +氧 | 50.16 | 128.37 | 2 | [46, 表 II] |
| $[(2b_2)^{-1}]$ $\overset{?}{\dashrightarrow}$ 氧$_2^+$ +氧 | 40.63 | 121.25 | 2 | |
| $[(4a_1)^{-1}]$ $\overset{?}{\dashrightarrow}$ 氧$_2^+$ +氧 | 29.11 | 118.45 | 2 | |
| [氧$_3^+$ 6 $^2B_2$, 5 $^2B_1$, ...]* | 20.00 | 89.13 | [2] | [15, 表 I] |
| [氧$_3^+$ 3 $^2A_1$, 4 $^2B_2$]* | 17.30 | 75.85 | [2] | |
| [氧$_3^+$ 2 $^2B_1$]* | 16.57 | 93.66 | [2] | |
| $(1a_2)^{-1}$ --→氧$_3^+$ $\tilde{B}^2A_2$* | 13.54 | 87.36 | 2 | |
| $(4b_2)^{-1}$ --→氧$_3^+$ $\tilde{A}^2B_2$ | 13.00 | 89.56 | 2 | |
| $(6a_1)^{-1}$ --→氧$_3^+$ $\tilde{X}^2A_1$ | 12.73 | 77.85 | 2 | |

## 参考文献


[1]C.J. Allan、U. Gelius、D.A. Allison、G. Johansson、H. Siegbahn和K. Siegbahn。二氧化碳、二硫化碳和硫化羰的ESCA研究。《电子能谱与相关现象》，1(2):131–151，1972。ISSN 0368-2048。doi: https://doi.org/10. 1016/0368-2048(72)80027-6。URLhttps://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0368204872800276。

[2] D P Almeida、A C Fontes和C F L Godinho。氖的电子碰撞电离截面（sigma n+，n=1-5）。《物理学杂志*B*：原子、分子与光学物理》，28(15): 3335，1995年8月。doi: 10.1088/0953-4075/28/15/022。URLhttps://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/28/15/022。

[3] Michele Aresta、Angela Dibenedetto 和 Eugenio Quaranta。二氧化碳分子，第 1–34 页。施普林格柏林海德堡，柏林，海德堡，2016 年。ISBN 978-3-662-46831-9。doi: 10.1007/978-3-662-46831-9_1。网址https://doi.org/10.1007/978-3-662-46831-9_1。

[4] Jennifer W. Au 和 C. E. Brion。价电子壳层光吸收（2–200 eV）以及分子和解离光电离的绝对振子强度

（11–80 eV），二氧化氮。《化学物理》，218(1):109–126，1997。ISSN 0301- 0104。doi: https://doi.org/10.1016/S0301-0104(97)00065-7。URL https://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010497000657。[5] P. Baltzer、L. Karlsson、B. Wannberg、D.M.P. Holland、M.A. MacDonald、M.A. Hayes 和 J.H.D. Eland。NO2分子的价电子壳层光电子能谱实验研究。《化学物理》，237(3):451–470，1998。ISSN 0301-0104。doi: https://doi.org/10.1016/S0301-0104(98)00240-7。URL https: // www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010498002407。[6] M.Salim Banna、David C. Frost、Charles A. McDowell、Louis Noodleman 和 Barry Wallbank。通过X射线光电子能谱和X$\alpha$ 散射波方法研究臭氧的芯电子结合能。化学物理快报，49(2):213–217，1977。ISSN 0009-2614。doi: https://doi.org/10.1016/0009-2614(77)80572-1。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009261477805721。[7] Joseph Berkowitz。第六章——分截面。载于 Joseph Berkowitz（编），《光吸收、光电离与光电子能谱》，第155–357页。Academic Press，1979。ISBN 978-0-12-091650-4。doi: https://doi.org/10.1016/ B978-0-12-091650-4.50012-8。URL https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/B9780120916504500128。[8] E Brook、M F A Harrison 和 A C H Smith。氦、碳、氧和氮原子的电子碰撞电离截面测量数据。《物理学B辑：原子与分子物理》，11(17):3115–3132，1978年9月。doi: 10.1088/0022-3700/11/17/021。URL https://doi.org/10.1088/0022-3700/11/17/021。[9] Reinhard Bruch、Kwong T. Chung、William L. Luken 和 John C. Culberson。碳的KLL俄歇能谱重新标定。《物理评论A》，31:310–315，1985年1月。doi: 10.1103/PhysRevA.31.310。URL https://link.aps.org/doi/10. 1103/PhysRevA.31.310。[10] Paul E. Cade、K. D. Sales 和 Arnold C. Wahl。双原子分子的电子结构。III. A. $N_2(X^1\Sigma_g^+)$和$N_2^+(X^2\Sigma_g^+$, $A^2\Pi_u$, $B^2\Sigma_u^+$)分子离子的Hartree—Fock波函数及能量量值。《化学物理学杂志》，44(5):1973–2003，1966年3月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.1726972。URL https://doi.org/10.1063/ 1.1726972。[11]Hai-Bo Chang 和 Ming-Bao Huang。关于一氧化氮离子的电子态和失氧光解离的理论研究。ChemPhysChem，10(3):582–589，2009。doi: https://doi.org/10.1002/cphc.200800626。URL https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cphc.200800626。[12] O. Chanrion 和 T. Neubert。负流注放电产生逃逸电子。《地球物理研究杂志：空间物理》，115(A00E32)，2010。doi: 10.1029/2009JA014774。URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2009JA014774。

[13] E. Clementi 和 D. L. Raimondi. 基于自洽场函数的原子屏蔽常数。《化学物理学杂志》，38(11):2686–2689，1963年6月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.1733573。URL https://doi.org/10.1063/1.1733573.[14]D. E. Clemmer 和 P. B. Armentrout. 通过引导离子束质谱法直接测定 NO2 的绝热电离能。《化学物理学杂志》，97(4):2451–2458，1992年8月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.463083。URL https://doi.org/10.1063/1.463083.[15] H. Couto、A. Mocellin、C. D. Moreira、M. P. Gomes、A. Naves de Brito 和 M. C. A. Lopes. 臭氧的阈值光电子能谱。《化学物理学杂志》，124(20):204311，2006年5月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.2200702。URL https://doi.org/10.1063/1.2200702.[16] Sébastien Célestin 和 Victor P. Pasko. 闪电先导步进过程中以及瞬态发光事件中，流注指数增长产生的热失控电子的能量和通量。《地球物理研究杂志：空间物理》，116(A3)，2011年。doi: 10.1029/2010JA016260。URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2010JA016260.[17]H. Deutsch、P. Scheier、K. Becker 和 T. D. Märk. 修订 Deutsch-Märk（DM）公式对原子电子碰撞电离截面的计算所描述的高能行为。《国际质谱学杂志》，233(1):13–17，2004年。ISSN 1387-3806。doi: https://doi.org/10.1016/j.ijms.2003.06.002。URL https: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387380603004962。专刊：谨以此纪念 Tilmann Mark.[18]N.Lj. Djurić、I.M. Čadež 和 M.V. Kurepa. 电子碰撞导致的 H2O 和 D2O 总电离截面。《国际质谱学杂志》，83(3):R7–R10，1988年。ISSN 0168-1176。doi: https://doi.org/10.1016/0168-1176(88)80038-7。URL https: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168117688800387.[19] Brian J. Duke 和 Brian O'Leary. 非 Koopmans 分子。《化学教育杂志》，72(6):501，1995年6月。ISSN 0021-9584。doi: 10.1021/ed072p501。URL https: //doi.org/10.1021/ed072p501.[20]O. Edqvist、E. Lindholm、L. E. Selin 和 L. Åsbrink. 关于 $O_2$ 的光电子能谱。《物理学文摘》，1(1):25–30，1970年1月。doi: 10.1088/0031-8949/ 1/1/004。URL https://doi.org/10.1088/0031-8949/1/1/004.[21] O. Edqvist、L. åsbrink 和 E. Lindholm. 关于 NO 的光电子能谱。《自然研究杂志 A 辑》，26(9):1407–1410，1971年。doi: doi:10.1515/ zna-1971-0906。URL https://doi.org/10.1515/zna-1971-0906.[22] J.H.D. Eland 和 L. Karlsson. NO2 在最高 26 电子伏特能量下的解离光电离。《化学物理》，237(1):139–148，1998年。ISSN 0301-0104。doi: https://doi.org/10. 1016/S0301-0104(98)00237-7。URL https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0301010498002377.[23] Peter Erman. $N2+$ C态预解离概率的直接测量。

《物理学评论》，14(1-2):51，1976年7月。doi: 10.1088/0031-8949/14/1-2/010。URL https://dx.doi.org/10.1088/0031-8949/14/1-2/010.[24] Federica Frati、Myrtille O. J. Y. Hunault 和 Frank M. F. de Groot. 氧 K边X射线吸收光谱。《化学评论》，120(9):4056–4110，2020年。doi: 10.1021/ acs.chemrev.9b00439。URL https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00439。PMID: 32275144.[25]Gaudin、Albert 和 Hagemann、Robert. 通过100至2000电子伏特的电子，绝对测定氦、氖、氩和乙炔的总电离截面及部分电离截面。《化学物理学杂志》，64:1209–1221，1967年。doi: 10.1051/jcp/1967641209。URL https://doi.org/10.1051/jcp/1967641209.[26] Viktor Gedeon、Sergej Gedeon、Vladimir Lazur、Elizabeth Nagy、Oleg Zatsarinny 和 Klaus Bartschat. 使用 $b$-样条 $r$-矩阵-含赝态方法计算氟的电子碰撞激发和电离。《物理评论A》，89:052713，2014年5月。doi: 10.1103/PhysRevA.89.052713。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.89.052713.[27]T. W. Gorczyca、M. A. Bautista、M. F. Hasoglu、J. García、E. Gatuzz、J. S. Kaastra、T. R. Kallman、S. T. Manson、C. Mendoza、A. J. J. Raassen、C. P. de Vries 和 O. Zatsarinny. 原子氧的综合X射线吸收模型。《天体物理学杂志》，779(1):78，2013年11月。doi: 10.1088/0004-637X/779/1/78。URL https://dx.doi.org/10.1088/0004-637X/779/1/78.[28] M. Guerra、F. Parente、P. Indelicato 和 J. P. Santos. 用于电子碰撞电离的修正二元遭遇贝特模型。《国际质谱学杂志》，313:1–7，2012年。ISSN 1387-3806。doi: https://doi.org/10.1016/j.ijms.2011.12.003。URL https: // www.sciencedirect.com/science/article/pii/S138738061100474X.[29] G. J. M. Hagelaar 和 L. C. Pitchford. 求解玻尔兹曼方程以获得流体模型的电子输运系数和速率系数。《等离子体源科学与技术》，14(4):722，2005年10月。doi: 10.1088/0963-0252/14/4/011。URL https://dx.doi.org/10.1088/0963-0252/14/4/011.[30] Todd R. Hayes、Robert C. Wetzel 和 Robert S. Freund. 卤素原子电子碰撞电离截面的绝对测量。《物理评论A》，35:578–584，1987年1月。doi: 10.1103/PhysRevA.35.578。URL https://link.aps.org/doi/ 10.1103/PhysRevA.35.578.[31] Ingolf V. Hertel 和 Claus-Peter Schulz.《原子、分子与光学物理学2：分子与光子——光谱学与碰撞》。施普林格柏林海德堡，柏林，海德堡，2015年。ISBN 978-3-642-54313-5。doi: 10.1007/978-3-642-54313-5。URL https://doi.org/10.1007/978-3-642-54313-5.[32] K. P. Huber. $NO^+$ 离子的激发电子态。《加拿大物理学杂志》，46 (15):1691–1695，1968年。doi: 10.1139/p68-501。URL https://doi.org/10.1139/ p68-501。

[33] K. P. Huber 和 G. Herzberg。《双原子分子常数》第 IV 部分。《分子光谱与分子结构》。施普林格美国，马萨诸塞州波士顿，1979。ISBN 978- 1-4757-0961-2。doi: 10.1007/978-1-4757-0961-2_2。URL https://doi.org/10.1007/978-1-4757-0961-2_2。[34] Stefan E. Huber、Andreas Mauracher、Daniel Süß、Ivan Sukuba、Jan Urban、Dmitry Borodin 和 Michael Probst。聚变相关双原子分子的总电子碰撞电离截面与部分电子碰撞电离截面。《化学物理学杂志》，150(2):024306，2019。doi: 10.1063/1.5063767。URL https://doi.org/10.1063/1.5063767。[35]W. M. Huo 和 Y.-K. Kim。用于等离子体建模的电子碰撞截面数据。IEEE等离子体科学汇刊，27(5):1225–1240，1999。doi: 10.1109/27. 799798。[36] W. Hwang、Y.-K. Kim 和 M. E. Rudd。分子电子碰撞电离截面的新模型。《化学物理学杂志》，104(8):2956–2966，1996。doi: 10.1063/1.471116。URL https://doi.org/10.1063/1.471116。[37]Philipp Hönicke、Rainer Unterumsberger、Nils Wauschkuhn、Markus Krämer、Burkhard Beckhoff、Paul Indelicato、Jorge Sampaio、José Pires Marques、Mauro Guerra、Fernando Parente 和 José Paulo Santos。测定碳K壳层荧光产额的实验与理论方法。辐射物理与化学，202:110501，2023。ISSN 0969-806X。doi: https://doi.org/10.1016/ j.radphyschem.2022.110501。URL https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/S0969806X22005370。[38] M. Inokuti、S. J. Buckman、M. T. Elford 和 H. Tawara。2. 电子与原子的碰撞。载于 Y. Itikawa 编，《光子和电子与原子的相互作用》，第17 A卷，Landolt-Börnstein - Group I 基本粒子、原子核与原子，第2章。施普林格出版社柏林海德堡，2000。doi: 10. 1007/10547143_2。URL https://materials.springer.com/lb/docs/sm_lbs_978-3-540-69716-9_2。[39]Mitio Inokuti。快带电粒子与原子和分子的非弹性碰撞——重新审视贝特理论。《现代物理评论》，43:297–347，1971年7月。doi: 10.1103/RevModPhys.43.297。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/ RevModPhys.43.297。在这项工作中， $M$ 表示系统的约化质量$m_1m_2/（m_1+m_2）$，在我们的工作中记作 $\mu$。[40] Yukikazu Itikawa。电子与氮分子碰撞的截面。物理与化学参考数据杂志，35(1):31–53，2006。doi: 10.1063/1.1937426。URL https://doi.org/10.1063/1.1937426。[41] Yukikazu Itikawa。电子与氧分子碰撞的截面。物理与化学参考数据杂志，38(1):1–20，2009。doi: 10.1063/1.3025886。URL https: //doi.org/10.1063/1.3025886。[42]Yukikazu Itikawa。电子与一氧化氮碰撞的截面。物理与化学参考数据杂志，45(3):033106，2016。doi: 10.1063/1.4961372。URL https: // doi.org/10.1063/1.4961372。

[43] W. L. Jolly、K. D. Bomben 和 C. J. Eyermann。气态原子与分子的芯电子结合能。Atom Data Nucl Data，31(3):433–493，1984。ISSN 0092-640X。doi: https://doi.org/10.1016/0092-640X(84)90011-1。URL http: // www.sciencedirect.com/science/article/pii/0092640X84900111。[44] L. Karlsson、L. Mattsson、R. Jadrny、R. G. Albridge、S. Pinchas、T. Bergmark 和 K. Siegbahn。H2 16O、H2 18O 和 D2 16O价电子能谱中的同位素效应与振电子耦合效应。《化学物理学杂志》，62(12):4745–4752，1975年6月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.430423。URL https://doi.org/10.1063/1.430423。[45] Y. B. Kim、K. Stephan、E. Märk 和 T. D. Märk。电子碰撞引起的一氧化氮单电离与双电离：从阈值到180 eV。《化学物理学杂志》，74(12):6771–6776，1981年6月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.441082。URL https://doi.org/10.1063/1.441082。[46] Y.-K. Kim、W. Hwang、N. M. Weinberger、M. A. Ali 和 M. E. Rudd。大气分子的电子碰撞电离截面。《化学物理学杂志》，106 (3):1026–1033，1997年1月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.473186。URL https: //doi.org/10.1063/1.473186。[47] Yong-Ki Kim 和 Jean-Paul Desclaux。电子碰撞引起的碳、氮和氧电离。《物理评论A》，66:012708，2002年7月。doi: 10.1103/PhysRevA. 66.012708。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.66.012708。[48] Yong-Ki Kim 和 M. Eugene Rudd。电子碰撞电离的二元相遇偶极模型。《物理评论A》，50:3954–3967，1994年11月。doi: 10.1103/ PhysRevA.50.3954。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.50. 3954。[49] Yong-Ki Kim、José Paulo Santos 和 Fernando Parente。将二元相遇偶极模型扩展至相对论入射电子。《物理评论A》，62:052710，2000年10月。doi: 10.1103/PhysRevA.62.052710。URL https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevA.62.052710。[50] Toshikatsu Koga、Katsutoshi Kanayama、Shinya Watanabe 和 Ajit J. Thakkar。满足尖点和渐近约束的解析哈特里–福克波函数：He至Xe、$Li^+$ 至$Cs^+$、$H^-$ 至$I^-$。Int J Quantum Chem，71(6):491–497，1999。doi: 10. 1002/(SICI)1097-461X(1999)71:6<491::AID-QUA6>3.0.CO;2-T。URL https:// doi.org/10.1002/(SICI)1097-461X(1999)71:6<491::AID-QUA6>3.0.CO;2-T。[51]T Koopmans。论原子单个电子的波函数与本征值的对应关系。Physica，1(1):104–113，1934。ISSN 0031-8914。doi: https://doi.org/10.1016/S0031-8914(34)90011-2。URL https: // www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891434900112。[52] A. Kramida、Yu. Ralchenko、J. Reader 和 NIST ASD Team。NIST 原子光谱数据库（版本5.9）。[在线], 2022。URL https://physics.nist.gov/asd。[5月 28 2022]日，星期六[53] 。E. E. Kunhardt 和 Y. Tzeng。电子-分子角散射对电子速度分布形成的作用。《物理评论A》，34:2158–2166，9月

1986. doi: 10.1103/PhysRevA.34.2158. URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.34.2158.[54] C. Köhn 和 U. Ebert。由能量为 1 MeV 或更低的电子在空气中产生的电离簇射结构。《等离子体源科学与技术》，23(4):045001，2014 年 6 月。doi: 10.1088/0963-0252/23/4/045001。URL https://doi.org/10. 1088%2F0963-0252%2F23%2F4%2F045001.[55]H. Lefebvre-Brion。一氧化氮光电子能谱中的强度异常。化学物理快报，9(5):463–464，1971。ISSN 0009-2614。doi: https://doi.org/10. 1016/0009-2614(71)80269-5。URL https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/0009261471802695.[56] B. G. Lindsay 和 M. A. Mangan。5.1 电离。载于 Y. Itikawa 编，《光子和电子与分子的相互作用》，第 17 C 卷，Landolt-Börnstein - 第一组：基本粒子、原子核与原子。施普林格出版社柏林海德堡，2003。doi: 10.1007/10874891_2。URL https://materials.springer.com/lb/docs/ sm_lbs_978-3-540-45843-2_2.[57] B. G. Lindsay、M. A. Mangan、H. C. Straub 和 R. F. Stebbings。从阈值到 1000 电子伏特的电子碰撞电离一氧化氮和二氧化氮的绝对分截面。《化学物理学杂志》，112(21):9404–9410，2000 年 6 月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.481559。URL https://doi.org/10.1063/1.481559.[58]刘曼天、安竹、唐长欢、罗正明、彭秀峰和龙先官。实验测得的电子碰撞 K壳层电离截面。《原子数据与核数据》，76(2):213–234，2000。ISSN 0092-640X。doi: https://doi.org/10.1006/adnd.2000.0843。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X0090843X.[59] Xavier Llovet、Cedric J. Powell、Francesc Salvat 和 Aleksander Jablonski。电子碰撞引起的内壳层电离截面。物理与化学参考数据杂志，43 (1):013102，2014。doi: 10.1063/1.4832851。URL https://doi.org/10.1063/1. 4832851.[60]J.C. Lorquet 和 M. Desouter。气态离子的激发态。向 $N_2^+$ 的 $C^2\Sigma_u^+$ 态跃迁及其预解离。《化学物理快报》，16(1):136–140，1972。ISSN 0009-2614。doi: https://doi.org/10.1016/0009-2614(72)80475-5。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009261472804755.[61] Wolfgang Lotz。电子碰撞电离截面的经验公式。《物理学杂志》，206(2):205–211，1967。ISSN 0044-3328。doi: 10.1007/ BF01325928。URL https://doi.org/10.1007/BF01325928.[62] Toshio Masuoka 和 Ataru Kobayashi。二氧化氮（$NO_2$）的单光电离和双光电离截面，以及 $NO_2^+$ 和 $NO_2^{2+}$ 的离子碎裂。《化学物理》，302(1):31–41，2004。ISSN 0301-0104。doi: https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2004.03.009。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301010404001193。

[63] A. Mocellin、K. Wiesner、F. Burmeister、O. Björneholm 和 A. Naves de Brito。12 至 21 电子伏特区域内臭氧光电离的实验研究。《化学物理学杂志》，115(11):5041–5046，2001 年 9 月。ISSN 0021-9606。doi: 10.1063/1.1394945。URL https://doi.org/10.1063/1.1394945.[64]Karl A. Newson、Stephanie M. Luc、Stephen D. Price 和 Nigel J. Mason。臭氧的电子碰撞电离。《国际质谱学杂志》，148(3):203–213，1995。ISSN 0168-1176。doi: https://doi.org/10.1016/0168-1176(95)04300-A。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016811769504300A.[65] O J Orient 和 S K Srivastava。H2O、CO、CO2 和 CH4 的电子碰撞电离。《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》，20(15):3923，1987 年 8 月。doi: 10.1088/0022-3700/ 20/15/036。URL https://dx.doi.org/10.1088/0022-3700/20/15/036.[66] S. T. Perkins、D. E. Cullen、M. H. Chen、J. Rathkopf、J. Scofield 和 J. H. Hubbell。根据 LLNL评估原子数据库（EADL）编制的原子亚壳层和弛豫数据表与图，Z = 1–100。技术报告，劳伦斯利弗莫尔国家实验室（LLNL），1991 年 10 月。URL https://www.osti.gov/biblio/ 10121422.[67]W. C. Price。光电子能谱与分子结构。《国际物理化学评论》，1(1):1–30，1981。doi: 10.1080/01442358109353240。URL https: //doi.org/10.1080/01442358109353240.[68] Donald Rapp 和 Paula Englander-Golden。电子碰撞引起的气体电离和附着总截面。I. 正电离。《化学物理学杂志》，43 (5):1464–1479，1965。doi: 10.1063/1.1696957。URL https://doi.org/10.1063/ 1.1696957.[69] R. Rejoub、B. G. Lindsay 和 R. F. Stebbings。稀有气体电子碰撞电离绝对分截面和总截面的测定。《物理评论A》，65:042713，2002 年 4 月。doi: 10.1103/PhysRevA.65.042713。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.65.042713.[70] M. A. Ridenti、L. L. Alves、V. Guerra 和 J. Amorim。低约化电场下转动机制对氮气和一氧化氮电子群参数的作用。《等离子体源科学与技术》，24(3):035002，2015 年 4 月。doi: 10.1088/0963-0252/24/3/035002。URL https://doi.org/10.1088/0963-0252/24/3/035002.[71]M. M. Sant'Anna、A. S. Schlachter、G. Öhrwall、W. C. Stolte、D. W. Lindle 和 B. M. McLaughlin。原子氮的$K$壳层 X 射线能谱。《物理评论快报》，107:033001，2011 年 7 月。doi: 10.1103/PhysRevLett.107.033001。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.033001.[72] J. P. Santos、F. Parente 和 Y.-K. Kim。电子碰撞电离原子 K壳层的截面。《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》，36(21):4211–4224，2003 年 10 月。doi: 10.1088/0953-4075/36/21/002。URL https://doi.org/10. 1088%2F0953-4075%2F36%2F21%2F002。

[73]A. Schmalzried. 大气带电气体中的电子热失控：一种微观方法。博士论文，安达卢西亚天体物理研究所，2023年。网址 http://hdl.handle.net/10261/338079。[74] B. L. Schram、F. J. De Heer、M. J. van der Wiel 和 J. Kistemaker。惰性气体和双原子气体中电子（0.6–20 keV）的电离截面。Physica，31(1)：94–112，1965年。ISSN 0031-8914。doi：https://doi.org/10. 1016/0031-8914(65)90109-6。网址 https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/0031891465901096。[75]B. L. Schram、H. R. Moustafa、J. Schutten 和 F. J. de Heer。惰性气体和双原子气体中电子（100–600 eV）的电离截面。Physica，32(4)：734–740，1966年。ISSN 0031-8914。doi：https://doi.org/10. 1016/0031-8914(66)90005-X。网址 https://www.sciencedirect.com/science/ article/pii/003189146690005X。[76] Zhenjie Shen、Enliang Wang、Maomao Gong、Xu Shan 和 Xiangjun Chen。250至8000 eV范围内氮分子的电子碰撞电离截面。《电子能谱杂志》，225：42–48，2018年。ISSN 0368-2048。doi：https: // doi.org/10.1016/j.elspec.2018.03.009。网址 http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0368204817302931。[77]Kazuhiko Shibuya、Shinzo Suzuki、Takashi Imamura 和 Inosuke Koyano。采用阈值光电子-光离子符合技术研究态选择NO2+离子的解离。《物理化学杂志A》，101(4)：685–689，1997年1月。ISSN 1089-5639。doi：10.1021/jp962031f。网址 https://doi.org/10.1021/jp962031f。[78] I. Shimamura 和 K. Takayanagi（编）。电子-分子碰撞。原子与分子物理学。Plenum Press，纽约 [等地], 1984。ISBN 0-306-41531- 3。doi：10.1007/978-1-4613-2357-0。网址 https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4613-2357-0。[79] K. Siegbahn、C. Nordling、G. Johansson、J. Hedman、P. F. Hedén、K. Hamrin、U. Gelius、T. Bergmark、L. O. Werme、R. Manne 等。ESCA：应用于自由分子。北荷兰出版公司，1969年。网址 https://books. google.es/books?id=PM_bxQEACAAJ。[80] Kai Siegbahn、Carl Nordling 和 Anders Fahlman。ESCA：通过电子能谱研究原子、分子和固体结构。Almqvist and Wiksell，乌普萨拉，1967年。网址 http://lib.ugent.be/catalog/rug01:001343982。[81] M. Šimek 和 Z. Bonaventura。纳秒放电条件下$N_2$–$O_2$ 基态与激发态的非平衡动力学：扩展方案及与现有实验观测结果的比较。《物理学杂志D：应用物理》，51(50)：504004，2018年10月。doi：10.1088/1361-6463/aadcd1。网址 https: //doi.org/10.1088/1361-6463/aadcd1。[82] H. C. Straub、P. Renault、B. G. Lindsay、K. A. Smith 和 R. F. Stebbings。$H_2$, 、$N_2$, 和$O_2$ 的电子碰撞电离绝对分截面：从阈值起

至1000 eV。《物理评论A》，54：2146–2153，1996年9月。doi：10.1103/PhysRevA. 54.2146。网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.2146。[83] H. C. Straub、B. G. Lindsay、K. A. Smith 和 R. F. Stebbings。H2O和D2O的电子碰撞电离绝对分截面：从阈值至1000 eV。《化学物理学杂志》，108(1)：109–116，1998年1月。ISSN 0021-9606。doi：10.1063/1.475367。网址 https://doi.org/10.1063/1.475367。[84] K.H. Tan、C.E. Brion、Ph.E. Van der Leeuw 和 M.J. van der Wiel。H20s的光吸收、光电离和碎裂的绝对振子强度（10–60 eV）。《化学物理》，29(3)：299–309，1978年。ISSN 0301- 0104。doi：https://doi.org/10.1016/0301-0104(78)85080-0。网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0301010478850800。[85]H. Tanaka、M. J. Brunger、L. Campbell、H. Kato、M. Hoshino 和 A. R. P. Rau。原子与分子的标度平面波玻恩截面。《现代物理评论》，88：025004，2016年5月。doi：10.1103/RevModPhys.88.025004。网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.88.025004。[86]H. Tawara、K.G. Harrison 和 F.J. De Heer。电子碰撞产生轻原子与分子的X射线发射截面和荧光产额。Physica，63(2)：351–367，1973年。ISSN 0031-8914。doi：https://doi.org/10.1016/0031-8914(73)90321-2。网址 https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031891473903212。[87] S. S. Tayal 和 Oleg Zatsarinny。用于电子碰撞激发和电离原子氧的 $B$样条 $R$矩阵伪态方法。《物理评论A》，94：042707，2016年10月。doi：10.1103/PhysRevA.94.042707。网址 https: // link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.94.042707。[88] W R Thompson、M B Shah 和 H B Gilbody。电子碰撞导致原子氧单电离与双电离。《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》，28(7)：1321– 1330，1995年4月。doi：10.1088/0953-4075/28/7/023。网址 https://doi.org/10. 1088/0953-4075/28/7/023。[89] L Vriens。二元碰撞理论中的电子交换。《物理学会会刊》，89(1)：13–21，1966年9月。doi：10.1088/0370-1328/89/1/304。网址 https://doi.org/10.1088/0370-1328/89/1/304。[90]Yang Wang、Oleg Zatsarinny 和 Klaus Bartschat。用于电子碰撞激发和电离碳的$b$样条 $r$矩阵伪态计算。《物理评论A》，87：012704，2013年1月。doi：10.1103/PhysRevA.87.012704。网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.012704。[91]Yang Wang、Oleg Zatsarinny 和 Klaus Bartschat。用于电子碰撞激发和电离氮的B样条R矩阵伪态计算。《物理评论A》，89：062714，2014年6月。doi：10.1103/PhysRevA.89.062714。网址 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.89.062714。[92] K Wiesner、R.F Fink、S.L Sorensen、M Andersson、R Feifel、I Hjelte、C Miron、A Naves de Brito、L Rosenqvist、H Wang、S Svensson 和 O Björneholm。

臭氧的价电子光电离与共振芯层激发——实验˜与理论研究：氧的C态$3_+$。 化学物理快报，375(1):76–83，2003。ISSN 0009-2614。doi: https://doi.org/10.1016/S0009-2614(03)00818-2。URLhttps://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261403008182。

[93] S. M. Younger 和 T. D. Märk。电子电离的半经验与半经典近似，第2章，第24–41页。Springer Vienna，维也纳，1985。ISBN 978-3-7091-4028-4。doi: 10.1007/978-3-7091-4028-$4_2$。URLhttps://doi.org/10.1007/978-3-7091-4028-4_2。

[94] Oleg Zatsarinny 和 Klaus Bartschat。用于原子过程的B样条R矩阵方法：在原子结构、电子碰撞和光电离中的应用。《物理学杂志*B*：原子、分子与光学物理》，46(11):112001，2013年5月。doi: 10.1088/0953-4075/ 46/11/112001。URLhttps://dx.doi.org/10.1088/0953-4075/46/11/112001。