

# W<sup>65+</sup>—W<sup>71+</sup> 离子 2s<sub>1/2</sub>—2p<sub>3/2</sub> 电子碰撞激发过程及相应辐射跃迁谱线极化度的理论研究\*

马小云 董晨钟<sup>†</sup> 武中文 蒋军 颌录有

(甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2012年4月14日收到; 2012年5月27日收到修改稿)

利用基于多组态 Dirac-Fock 理论方法的原子结构及性质计算程序 GRASP92, 详细研究了类氟 W<sup>65+</sup> 到类锂 W<sup>71+</sup> 离子的 2p<sub>3/2</sub>—2s<sub>1/2</sub> 跃迁性质. 计算结果与 Podpaly 等 [*Phys. Rev. A* **80** 052504 (2009)] 的实验结果符合得非常好. 在此基础上, 利用全相对论扭曲波方法研究了 2s<sub>1/2</sub>—2p<sub>3/2</sub> 的电子碰撞激发总截面和磁子能级碰撞激发截面以及部分谱线的线性极化度, 分析了电子碰撞激发截面和谱线线性极化度随碰撞能量的变化规律.

**关键词:** 高离化态钨离子, 电子碰撞激发, 跃迁概率, 线性极化度

**PACS:** 34.80.Dp

## 1 引言

钨由于其熔点高、磨损率低、化学性质稳定等特点<sup>[1]</sup>, 已被选为国际热核聚变反应堆 (ITER) 装置偏滤器区域的等离子体壁材料. 在 ITER 运行条件下, 等离子体中的电子温度可达到 25—40 keV<sup>[2,3]</sup>, 此时钨可能作为杂质进入等离子体中而处在不同的离化态和激发态, 这些钨离子将在 ITER 中发生强的辐射, 而辐射会损失能量, 从而影响磁约束聚变点火条件的实现. 另一方面钨离子的辐射谱又可以作为一个很好的等离子体诊断工具<sup>[4]</sup>. 例如, 从不同离化度离子发射的谱线, 可以推测聚变等离子体的温度及电子密度<sup>[5]</sup>, 可以由 L 壳层的线辐射得到等离子体中心膨胀速度<sup>[6]</sup>等. 然而, 在这些研究中需要大量高精度的原子参数, 特别是相关钨离子的能级结构及电子碰撞激发过程的截面<sup>[7]</sup>. 过去人们已经对钨离子的能级结构及各种碰撞动力学过程进行了大量研究. 如在理论方面, James 等<sup>[8]</sup>用多体微扰理

论研究了钨原子的光电离截面; Balance 等<sup>[9]</sup>用相对论  $R$  矩阵方法计算了 W<sup>46+</sup> 的电子碰撞激发速率系数, 计算中考虑了共振态辐射退激到稳定态的能量损失, Shen 等<sup>[10]</sup>利用全相对论扭曲波 (RDW) 方法进行了类似的工作; Behar 等<sup>[11]</sup>用多组态相对论 HULLAC 程序研究了 W<sup>64+</sup> 双电子复合截面和速率系数; Loch 等<sup>[12]</sup>采用半相对论组态平均扭曲波方法和相对论组态平均扭曲波方法计算了等核系列 W 离子的电子碰撞电离截面; Safronova 等<sup>[13]</sup>利用相对论多体微扰理论方法和 Hartree-Fock 相对论方法计算了 W<sup>27+</sup> 的激发能、辐射跃迁和自电离概率、双电子伴线和双电子复合速率系数; Chen 等<sup>[14]</sup>用相对论组态相互作用方法研究了 W<sup>56+</sup>—W<sup>64+</sup> 离子  $n = 3—3$  的跃迁能, 并考虑了 Breit 相互作用、量子电动力学 (QED) 效应及质量极化效应对能级的贡献. 实验方面, 随着实验装置和技术的发展, 人们利用 EBIT<sup>[15–17]</sup>、Tokamak<sup>[18,19]</sup> 和 Stellarator<sup>[20]</sup> 等装置也进行了一系列高精度的电子与钨离子碰撞过程的实验研究. 例如, Ralchenko 等<sup>[21]</sup>在 NIST-

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11274254, 10964010, 11147018)、国家自然科学基金重大研究计划 (批准号: 91126007)、甘肃省中青年科技基金 (批准号: 1107RJYA003) 和甘肃省高等学校科研业务费专项基金资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

EBIT 上观测到了  $W^{54+}$ — $W^{63+}$  离子的 EUV 谱; Clementson 等 [22] 在 LLNL-EBIT 中测量了  $W^{55+}$ — $W^{64+}$  离子的  $3p_{3/2}$ — $3s_{1/2}$  和  $3d_{3/2}$ — $3p_{1/2}$  辐射跃迁谱线的波长; Schippers 等 [23] 在重离子储存环上利用合并束技术测量了  $W^{19+}$  离子的双电子复合速率系数; Müller 等 [24] 在同步辐射装置上测量了  $W^+$ — $W^{3+}$  及  $W^{5+}$  离子的光电离截面等. 最近, Podpaly 等 [6] 在 LLNL-EBIT 中观测到了  $W^{65+}$ — $W^{71+}$  离子的  $n = 2$ — $2$  跃迁谱, 研究发现其中的 11 条强谱线是由类锂到类氟钨离子通过  $2p_{3/2}$ — $2s_{1/2}$  跃迁产生的, 而直接电子碰撞是激发这些谱线形成的主要机制.

本文利用基于多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法的程序 GRASP92 [25] 和 REOS99 [26], 研究了类氟  $W^{65+}$  到类锂  $W^{71+}$  离子的  $2p_{3/2}$ — $2s_{1/2}$  跃迁中产生的上述 11 条谱线的跃迁能及辐射跃迁概率, 并进一步利用我们最近的发展研究电子与原子 (离子) 碰撞激发过程的全相对论扭曲波程序 REIE06 [27–31], 计算了在不同入射电子能量下这些钨离子  $2s_{1/2}$ — $2p_{3/2}$  电子碰撞激发截面及相应辐射跃迁谱线的线性极化度, 分析了激发截面和线性极化度随入射电子能量的变化规律, 期望对相应过程的激发截面和谱线极化度的进一步测量有所帮助.

## 2 理论方法

相对论扭曲波方法中, 选  $z$  轴为入射电子的运动方向, 则入射电子轨道角动量的  $z$  分量等于零, 即  $m_{l_i} = 0$ . 那么, 具有能量为  $\varepsilon_i$  的自由电子与靶离子发生碰撞, 使靶离子从初态  $\beta_i J_i M_i$  到末态  $\beta_f J_f M_f$  的电子碰撞激发截面 [32,33] 可以表示成

$$\begin{aligned} & \sigma_{\varepsilon_i}(\beta_i J_i M_i - \beta_f J_f M_f) \\ &= \frac{2\pi a_0^2}{k_i^2} \sum_{\substack{l_i, l'_i, j_i, j'_i, m_{s_i} \\ l_f, j_f, m_f}} \sum_{J, J', M} (i)^{l_i - l'_i} \\ & \times [(2l_i + 1)(2l'_i + 1)]^{1/2} \\ & \times \exp[i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})] C\left(l_i \frac{1}{2} m_{l_i} m_{s_i}; j_i m_i\right) \\ & \times C\left(l'_i \frac{1}{2} m_{l'_i} m_{s_i}; j'_i m_i\right) C(J_i j_i M_i m_i; JM) \\ & \times C(J_i j_i M_i m_i; J'M) C(J_f j_f M_f m_f; JM) \\ & \times C(J_f j_f M_f m_f; J'M) R(\gamma_i, \gamma_f) R(\gamma'_i, \gamma'_f), \quad (1) \end{aligned}$$

其中,  $i$  和  $f$  表示初、末态;  $a_0$  是波尔半径,  $C$  为  $CG$  系数;  $\gamma_i = \varepsilon_i l_i j_i \beta_i J_i J M$ ,  $\gamma_f = \varepsilon_f l_f j_f \beta_f J_f J M$ ;  $J$  和  $M$  分别为碰撞体系的总角动量及其  $z$  分量;  $\beta$  表示确定初末态需要的其他量子数;  $m_{s_i}, l_i, j_i, m_{l_i}$  和  $m_i$  为相应的连续电子  $i$  的自旋、轨道角动量、总角动量及其  $z$  分量;  $\kappa$  为相应于轨道角动量和总角动量  $l, j$  的相对论量子数.

$\delta_{\kappa}$  为电子的相因子, 它是入射能量和相对论量子数的函数, 由下式给出 [32]

$$\delta_{\kappa} = \delta_{\kappa C} + \Delta\delta_{\kappa}, \quad (2)$$

其中,  $\delta_{\kappa C}$  为电子在库仑场作用下的相移;  $\Delta\delta_{\kappa}$  为小  $r$  处连续电子感受到的势并不完全是库伦势 (如 Dirac-Fock-Slater 势) 而引起的修正.  $\delta_{\kappa C}$  可表示为 [34]

$$\delta_{\kappa C} = \eta - \arg\Gamma(\gamma + iy) - \frac{\pi}{2}\gamma + \frac{\pi}{2}(l + 1), \quad (3)$$

$\eta, \gamma$  和  $y$  易知 [32], 从而可得  $\delta_{\kappa C}$ .  $\Delta\delta_{\kappa}$  由下式给出 [32]

$$\Delta\delta_{\kappa} = \delta'_{\kappa} - \delta'_{\kappa C}, \quad (4)$$

其中,  $\delta'_{\kappa}$  为大  $r$  处电子在 Dirac-Fock-Slater 势下径向波函数大小分量 ( $P_{\varepsilon_{\kappa}}(r), Q_{\varepsilon_{\kappa}}(r)$ ) 的相移;  $\delta'_{\kappa C}$  为电子受到一个纯库伦势 ( $-2z/r$ ) 作用时所得径向波函数的相移, 由下式可求 [32]

$$\delta'_{\kappa} = -kr_0 - y \ln(2kr_0), \quad (5)$$

其中,  $r_0$  为  $P_{\varepsilon_{\kappa}}(r)$  的最后一个节点位置处的轨道半径 [35].  $\delta'_{\kappa C}$  由相同的式子给出, 不同之处在于对所有  $r$ , 径向波函数微分方程中将 Dirac-Fock-Slater 势换作库伦势求解即可.

$k_i$  为入射电子相对论波数,  $k_i$  与能量  $\varepsilon_i$  的关系为

$$k_i^2 = \varepsilon_i \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{4} \varepsilon_i \right], \quad (6)$$

$\alpha$  是精细结构常数.  $R$  为与  $M$  无关的散射矩阵元, 可表示为

$$\begin{aligned} R(\gamma_i, \gamma_f) = & \left\langle \gamma_f J_f, \varepsilon_f \kappa_f; J \left| \sum_{p,q,p<q}^{N+1} (V_{\text{Coul}} \right. \right. \\ & \left. \left. + V_{\text{Breit}} \right) \gamma_i J_i, \varepsilon_i \kappa_i; J \right\rangle, \quad (7) \end{aligned}$$

$V_{\text{Coul}}$  和  $V_{\text{Breit}}$  分别为库仑算符和 Breit 算符.  $|\gamma_i J_i, \varepsilon_i \kappa_i; J\rangle$  和  $|\gamma_f J_f, \varepsilon_f \kappa_f; J\rangle$  是  $N + 1$  电子碰撞

体系反对称化的初、末态的波函数, 即

$$\begin{aligned}
 & |\gamma_t J_t, \varepsilon \kappa; J\rangle \\
 = & \frac{1}{(N+1)^{1/2}} \sum_{p=1}^N (-1)^{N+1-p} \sum_{M_t, m} C(J_t j M_t m; JM) \\
 & \times |\alpha(P_t J_t M_t)\rangle |\varepsilon \kappa m\rangle, \quad (8)
 \end{aligned}$$

式中,  $t$  代表靶离子 ( $t = i$  为初态,  $t = f$  为末态),  $|\varepsilon \kappa m\rangle$  为连续电子的波函数,  $|\alpha(P_t J_t M_t)\rangle$  为靶离子波函数. 靶离子波函数采用了 MCDF 方法的波函数 [25,36], 它是由具有相同宇称  $P$ 、总角动量  $J$  和总角动量  $z$  分量  $M$  的组态波函数线性组合而成, 它可以用广泛使用的计算原子结构和性质的程序包 GRASP92 [25] 得到. 连续电子的波函数类似于单个束缚电子 Dirac 自旋轨道波函数 [37,38], 可以表示为

$$u_{\varepsilon \kappa m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{\varepsilon \kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{\varepsilon \kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (9)$$

式中,  $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi)$  为自旋球谐函数,  $P_{\varepsilon \kappa}(r)$  和  $Q_{\varepsilon \kappa}(r)$  分别为径向波函数的大小分量, 对于给定能量的连续电子其径向波函数可通过求解耦合 Dirac 方程 [34,38] 而得到.

根据含时微扰理论, 原子从初态  $i$  到末态  $f$  之间跃迁的 Einstein 自发辐射跃迁概率可以表示为

$$A_{fi} = \frac{2\pi}{2j_i + 1} \sum_{M_i} \sum_{M_f} |M_{fi}^{(L)}|^2, \quad (10)$$

其中,  $j_i$  是激发态  $i$  的总角动量,  $M_{fi}$  是跃迁矩阵元, 可以表示为

$$\begin{aligned}
 M_{fi}^{(L)} & = \langle \alpha_f(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \alpha_i(P_i J_i M_i) \rangle \\
 & = \sum_{r,s} C_r(f) C_s(i) \langle \Gamma_r P_f J_f M_f | \\
 & \quad \times | O^{(L)} | \Gamma_s(P_i J_i M_i) \rangle, \quad (11)
 \end{aligned}$$

上式中  $O^{(L)}$  是辐射电磁场的  $L$  阶张量算符. 在长度和速度规范下, 可以得到相应的跃迁概率, 通过比较数据的一致性可以判断计算结果的准确性.

实验上辐射跃迁谱线的线性极化度 [39] 定义为

$$P = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}}, \quad (12)$$

其中,  $I_{\parallel}$  和  $I_{\perp}$  为光子的电矢量分别平行和垂直于电子束方向的光强度. 如果直接电子碰撞激发是上磁子能级电子布居的主要形成机制, 那么, 对

于  $J = 3/2$  到  $J = 1/2$  辐射谱线的极化度可表示为 [39]

$$P = \frac{3(\sigma_{1/2} - \sigma_{3/2})}{5\sigma_{1/2} + 3\sigma_{3/2}}, \quad (13)$$

其中,  $\sigma_{1/2}$  和  $\sigma_{3/2}$  分别对应于从基态到末态磁量子能级  $M_f = 1/2$  和  $M_f = 3/2$  上的电子碰撞激发截面. 对于  $J = 1$  到  $J = 0$  辐射谱线的线性极化度可表示为 [39]

$$P = \frac{\sigma_0 - \sigma_1}{\sigma_0 + \sigma_1}, \quad (14)$$

其中,  $\sigma_0$  和  $\sigma_1$  分别为从基态到激发态磁量子能级  $M_f = 0$  和  $M_f = 1$  上的电子碰撞激发截面.

### 3 结果与讨论

对于处在基态的类锂到类氟钨离子, 其从基态激发一个  $2s$  电子到次壳层  $2p_{3/2}$  可形成多个激发态能级, 从这些激发态向基态辐射跃迁可形成许多辐射谱线. 在目前的理论研究中, 我们主要考虑了实验上观测到的最强的 11 条电偶极辐射跃迁, 对其跃迁能和跃迁概率及相应的电子碰撞激发性质进行了详细研究. 为了更好地考虑电子关联效应, 我们的计算中包括了从  $1s$  激发一个电子到  $2s$ ,  $2p$  次壳层形成的所有可能组态波函数, 对靶离子初、末态波函数进行独立优化, 并考虑了 Breit 相互作用、QED 效应和原子核有限体积分对能级的贡献, 同时在碰撞矩阵元中也包含了 Breit 相互作用的贡献. 为了确保分波的收敛性, 我们取入射 (或散射) 电子的最大相对论量子数  $\kappa = 50$ .

表 1 列出了类锂到类氟钨离子  $2p_{3/2} - 2s_{1/2}$  跃迁产生的 11 条电偶极辐射跃迁谱线, 为了表示的一致性, 文中不同的跃迁采用了等电子序列标记, 例如, 对于类锂钨离子的  $2p_{3/2} - 2s_{1/2}$  跃迁线用 Li 标记, 类硼钨离子的两条  $2p_{3/2} - 2s_{1/2}$  跃迁线则用 B-1, B-2 进行了标记. 表 2 给出了目前计算得到的跃迁能及相应跃迁概率及 Podpaly 等 [6] 的实验和理论结果. 可以看到, 跃迁概率与文献 [6] 给出的 FAC 计算结果符合得很好, 跃迁能除了 Li 谱线和 F 谱线对应的跃迁之外, 其他结果均优于文献 [6] 给出 FAC 计算结果, 并与实验结果符合得很好, 相对误差不超过 0.3%. 这也从侧面反映了我们目前的计算精度.

表 3 给出了不同入射电子能量 (阈值单位) 下类锂到类氟钨离子  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  电子碰撞激发截面的计算结果. 可以看出, 入射电子能量在阈值附近时截面最大, 随着入射电子能量的增大, 截面逐渐减小. 在 1—3 倍阈值能量的范围内, 截面随入射电子能量增大迅速减小, 在更高的入射能量

区域, 入射电子能量的增加对截面的变化影响很小. 从表中也可以看到, 5 倍阈值处的截面与阈值处的相比减小了 3 倍. 例如, 对于类碳  $W^{68+}$  离子的  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  激发, 在阈值处, 激发截面为  $15.71 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$ , 而在 5 倍阈值时对应截面为  $4.06 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$ .

表 1 类锂到类氟钨离子  $2p_{3/2}-2s_{1/2}$  的 11 个电偶极跃迁

离子	谱线	基组态	$J/$ 宇称	激发组态	$J/$ 宇称
$W^{71+}$	Li	$1s^2 2s$	$1/2+$	$1s^2 2p_{3/2}$	$3/2-$
$W^{70+}$	Be	$1s^2 2s^2$	$0+$	$1s^2 2s 2p_{3/2}$	$1-$
$W^{69+}$	B-1	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}$	$1/2-$	$(1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}) 1 2p_{3/2}$	$3/2+$
	B-2	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}$	$1/2-$	$(1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}) 1 2p_{3/2}$	$1/2+$
$W^{68+}$	C	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2$	$0+$	$1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	$1-$
$W^{67+}$	N-1	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	$3/2-$	$1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	$5/2+$
	N-2	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	$3/2-$	$1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	$1/2+$
	N-3	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}$	$3/2-$	$1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	$3/2+$
$W^{66+}$	O-1	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	$2+$	$1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	$2-$
	O-2	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	$2+$	$1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	$1-$
$W^{65+}$	F	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	$3/2-$	$1s^2 2s_{1/2} 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	$1/2+$

表 2 类锂到类氟钨离子  $2p_{3/2}-2s_{1/2}$  的 11 条电偶极跃迁谱线的跃迁能和跃迁概率

谱线	跃迁能/eV			跃迁概率 / $10^{13} \text{ s}^{-1}$	
	实验 [6]	本文	FAC[6]	本文	FAC[6]
Li	$1697.34 \pm 1.03$	1694.5	1697.5	0.809	0.7988
Be	$1741.08 \pm 1.25$	1739.4	1743.8	1.196	1.156
B-1	$1768.71 \pm 1.40$	1766.8	1771.2	1.222	1.173
B-2	$1766.62 \pm 1.39$	1764.5	1769.4	1.330	1.283
C	$1801.07 \pm 1.60$	1798.9	1803.9	1.320	1.266
N-1	$1733.55 \pm 1.20$	1734.1	1735.5	0.310	0.294
N-2	$1840.44 \pm 1.90$	1841.3	1842.6	1.145	1.091
N-3	$1841.84 \pm 1.88$	1843.2	1844.1	2.120	2.023
O-1	$1805.91 \pm 1.63$	1805.9	1808.4	1.080	1.020
O-2	$1891.01 \pm 2.25$	1891.2	1893.3	1.986	1.886
F	$1871.16 \pm 2.10$	1867.4	1869.9	2.369	2.232

表 3 不同入射能量下,类锂到类氟钨离子  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  碰撞激发截面 /  $10^{-21} \text{ cm}^2$

标记	激发能/eV	入射电子能量/阈值单位									
		1.0	1.2	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
Li	1694.5	8.74	7.48	6.10	4.72	3.89	3.33	2.93	2.62	2.38	2.19
Be	1739.4	16.63	14.26	11.67	9.06	7.48	6.42	5.65	5.08	4.62	4.26
B-1	1766.8	10.52	9.03	7.37	5.74	4.75	4.07	3.59	3.22	2.94	2.71
B-2	1764.5	5.73	4.95	4.05	3.14	2.60	2.23	1.97	1.77	1.61	1.48
C	1798.9	15.71	13.49	11.16	8.59	7.09	6.10	5.37	4.83	4.40	4.06
N-1	1734.1	2.43	2.09	1.70	1.31	1.07	0.91	0.80	0.71	0.65	0.59
N-2	1841.3	2.10	1.82	1.49	1.16	0.95	0.82	0.72	0.65	0.59	0.54
N-3	1843.2	7.57	6.55	5.37	4.18	3.45	2.97	2.62	2.35	2.15	1.98
O-1	1805.9	4.34	3.73	3.06	2.37	1.96	1.68	1.48	1.32	1.21	1.11
O-2	1891.2	3.84	3.32	2.72	2.11	1.75	1.50	1.33	1.19	1.09	1.00
F	1867.4	4.07	3.49	2.87	2.23	1.85	1.59	1.40	1.26	1.14	1.05

图 1(a)—(d) 分别给出了类锂  $W^{71+}$ 、类铍  $W^{70+}$ 、类硼  $W^{69+}$  和类碳  $W^{68+}$  离子的  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  电子碰撞激发总截面和各磁子能级截面随入射电子能量的变化关系. 可以看出: 随着入射能量的增大, 总截面和磁子能级截面都逐渐减小, 显现出很强的规律性. 对于类铍  $W^{70+}$  离子的  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  激发, 在阈值附近, 激发到磁子能级  $M_f = 0$  上的截面明显大于到  $M_f = 1$  上的截面, 且随着能量的增大, 到  $M_f = 0$  上的截面迅速减小, 而到  $M_f = 1$  上的截面减小的相对缓慢. 这一结果与 Reed 和 Chen<sup>[40]</sup> 对类氦等电子序列离子  $1s^2-1s2p$  电子碰撞激发的研究结果相一致. 其变化与初末态动量转移有关<sup>[38]</sup>. 我们可以看到, 类碳  $W^{68+}$  离子  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  激发的各磁子能级截面和总截面与类铍  $W^{70+}$  离子的截面也具有类似的变化规律. 而对于  $W^{71+}$  离子的碰撞激发, 从图中可以看出, 在相同入射电子能量下, 电子优先占据磁子能级  $M_f = 1/2$ , 激发到磁子能级  $M_f = -1/2$  的截面最小; 随着入射电子能量的增大, 各磁子能级上的截面都迅速减小, 且在 4 倍阈值附近激发

到  $M_f = 1/2$  与  $M_f = 3/2$  上的磁子能级截面之间发生了交叉的现象; 而激发到磁子能级  $M_f = -1/2$  的截面在整个能量范围内的变化却很小; 此外, 由于激发到  $M_f = -3/2$  上的截面比其他磁子能级 ( $M_f = -1/2, 1/2, 3/2$ ) 的截面要小两个数量级, 所以图中没有给出. 同样, 类硼  $W^{69+}$  也具有类似的规律.

图 2 给出了类锂到类氟钨离子  $2p_{3/2}-2s_{1/2}$  跃迁谱线的线性极化度在不同入射电子能量 (阈值单位) 下的变化情况. 可以看出, 随着入射能量的增大, 四条谱线的极化度都逐渐减小; Be 谱线和 C 谱线, Li 谱线和 B-1 谱线的变化基本一致; 且在给定入射能量下, Be 谱线和 C 谱线的极化度明显大于 Li 谱线和 B-1 谱线; 如在阈值处, Be 谱线极化度为 0.339, Li 谱线的极化度为 0.184, 在 5 倍阈值附近时, Be 谱线和 Li 谱线的极化度分别减小到了 0.162 和 0.086. 其原因是, 辐射谱线的极化度主要取决于激发态磁子能级统计布居的差异, 在给定能量范围下, 各磁子能级激发截面的相对改变并不相等, 从而导致了极化度发生了变化.

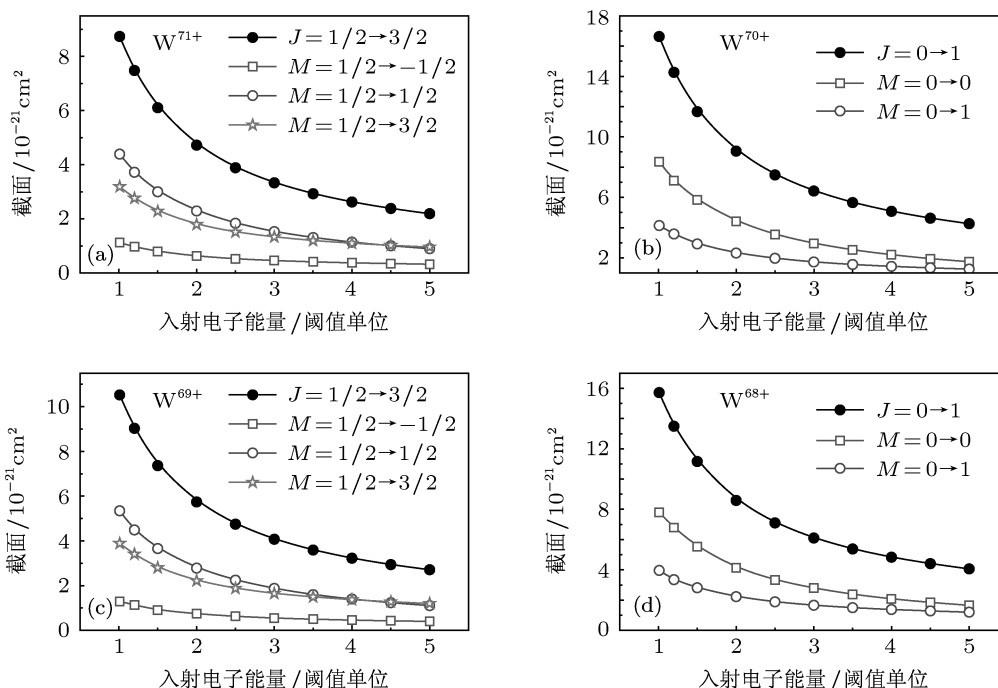


图1 类锂到类碳钨离子  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  激发总截面和各磁子能级截面随入射电子能量的变化关系 (a), (c) 中  $J=1/2-3/2$  表示  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  激发的总截面,  $M=1/2-1/2, 1/2-1/2, 1/2-3/2$  表示从基态分别到激发态磁子能级  $M_f = -1/2, 1/2, 3/2$  上的截面, (b), (d) 中  $J=0-1$  表示  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  激发的总截面,  $M=0-0, 0-1$  表示从基态分别到激发态磁子能级  $M_f = 0, 1$  上的截面

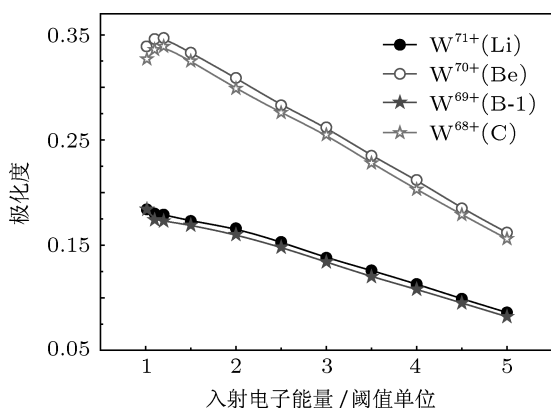


图2 类锂到类碳钨离子  $2p_{3/2}-2s_{1/2}$  部分跃迁谱线线性极化度随入射电子能量的变化关系

## 4 结论

本文利用多组态 Dirac-Fock 理论方法, 首先计算了类锂到类氟钨离子  $2p_{3/2}-2s_{1/2}$  的跃迁能

和跃迁概率, 随后用 RDW 方法研究了相应钨离子  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  电子碰撞激发总截面和磁子能级截面, 并进一步讨论了相应辐射跃迁谱线极化度及其变化规律. 结果表明: 对于钨离子  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  激发的总截面, 在阈值附近处最大, 随着入射能量的增大逐渐递减, 5 倍阈值处减小了近 75%. 对于类铍  $W^{70+}$ 、类碳  $W^{68+}$  离子  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  的磁量子能级截面, 电子优先占据  $M_f = 0$  能级, 随着入射能量的增大, 激发到磁子能级  $M_f = 0$  和  $M_f = 1$  上的截面逐渐减小并趋于平缓; 对于类锂  $W^{71+}$ 、类硼  $W^{69+}$  离子, 电子优先占据  $M_f = 1/2$  能级, 随着入射能的增大, 激发到  $M_f = 1/2$  和  $M_f = 3/2$  上的截面也逐渐减小并开始出现交叉现象. 最后, 对于 Li 谱线、Be 谱线、B-1 谱线及 C 谱线的极化度, 我们发现, 随着入射电子能量增大均逐渐减小, 并显现很强的线性结构及变化规律.

[1] Reader J 2009 *Phys. Scr.* **T134** 014023

[2] Gormezano C, Sips A C C, Luce T C, Ide S, Becoulet A 2007 *Nucl. Fusion* **47** S285

[3] Donné A J H, Costley A E, Barnsley R, Bindslev H, Boivin R,

Conway G 2007 *Nucl. Fusion* **47** S337

[4] Skinner C H 2009 *Phys. Scr.* **T134** 014022

[5] Ralchenko Yu, Draganic I N, Osin D, Gillaspay J D, Reader J 2011 *Phys. Rev. A* **83** 032517

- [6] Podpaly Y, Clementson J, Beiersdorfer P, Williamson J, Brown G V, Gu M F 2009 *Phys. Rev. A* **80** 052504
- [7] Balance C P, Griffin D C 2007 *J. Phys. B* **40** 247
- [8] James J B, Zikir A, Hugh P K 1993 *Phys. Rev. A* **47** 4811
- [9] Balance C P, Griffin D C 2006 *J. Phys. B* **39** 3617
- [10] Shen T M, Chen C Y, Wang Y S, Zou Y M, Gu M F 2007 *J. Phys. B* **40** 3075
- [11] Behar E, Mandelbaum P, Schwob J L 1999 *Phys. Rev. A* **54** 2787
- [12] Loch S D, Ludlow J A, Pindzola M S, Whiteford A D, Griffin D C 2005 *Phys. Rev. A* **72** 052716
- [13] Safronova U I, Safronova A S, Beiersdorfer P, Johnson W R 2011 *J. Phys. B* **44** 035005
- [14] Chen M H, Cheng K T 2011 *Phys. Rev. A* **84** 012513
- [15] Henderson J R, Beiersdorfer P, Bennett C L 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 705
- [16] Knapp D A, Marrs R E, Elliott S R, Magee E W, Zasadzinski R 1993 *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* **334** 305
- [17] Clementson J, Beiersdorfer P, Gu M F 2010 *Phys. Rev. A* **81** 012505
- [18] Putterich T, Neu R, Biedermann C, Radtke R, ASDEX Upgrade Team 2005 *J. Phys. B* **38** 3071
- [19] Yanagibayashi J, Nakano T, Iwamae A, Kubo H, Hasuo M, Itami K 2010 *J. Phys. B* **43** 144013
- [20] Harte C S, Suzuki C, Kato T, Sakaue H A, Kato D, Sato K, Tamura N, Sudo S, Arcy R D, Sokell E, White J, Sullivan G O 2010 *J. Phys. B* **43** 205004
- [21] Ralchenko Yu, Draganic I N, Tan J N, Gillaspay J D, Pomeroy J M, Reader J, Feldman U, Holland G E 2008 *J. Phys. B* **41** 021003
- [22] Clementson J, Beiersdorfer P 2010 *Phys. Rev. A* **81** 052509
- [23] Schippers S, Bernhardt D, Müller A, Krantz C, Grieser M, Repnow R, Wolf A, Lestinsky M, Hahn M, Novotny O, Savin D W 2011 *Phys. Rev. A* **83** 012711
- [24] Müller A, Schippers S, Kilcoyne A L D, Esteves D 2011 *Phys. Scr.* **T144** 014052
- [25] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 249
- [26] Fritzsche S, Fischer C, Dong C Z 2002 *Comput. Phys. Commun.* **124** 340
- [27] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G 2008 *Phys. Rev. A* **78** 022709
- [28] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G, Yan J, Fritzsche S 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 691
- [29] Wu Z W, Jiang J, Dong C Z 2011 *Phys. Rev. A* **84** 032713
- [30] Xie L Y, Zhang Z Y, Dong C Z, Jiang J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6249 (in Chinese) [ 颌录有, 张志远, 董晨钟, 蒋军 2008 物理学报 **57** 6249 ]
- [31] Yang N X, Jiang J, Xie L Y, Dong C Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2888 (in Chinese) [ 杨宁选, 蒋军, 颌录有, 董晨钟 2008 物理学报 **57** 2888 ]
- [32] Zhang H L, Sampson D H, Clark R E H 1990 *Phys. Rev. A* **41** 198
- [33] Zhang H L, Sampson D H 2002 *Phys. Rev. A* **66** 042704
- [34] Rose M E 1961 *Relativistic Electron Theory* (Vol. 5) p207 (New York: Wiley)
- [35] Zhang H L, Sampson D H, Mohanty A K 1989 *Phys. Rev. A* **40** 616
- [36] Dong C Z, Fritzsche S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 012507
- [37] Sampson D H, Zhang H L, Mohanty A K 1989 *Phys. Rev. A* **40** 604
- [38] Zhang H L, Sampson D H 1990 *Phys. Rev. A* **42** 5378
- [39] Percival I C, Seaton M J 1958 *Philos. Trans. R. Soc. London A* **251** 113
- [40] Reed K J, Chen M H 1993 *Phys. Rev. A* **48** 3644

# Theoretical study on electron-impact excitation processes and the relevant polarization of radiation of $2s_{1/2}-2p_{3/2}$ in $W^{65+}$ through $W^{71+}$ \*

Ma Xiao-Yun Dong Chen-Zhong<sup>†</sup> Wu Zhong-Wen Jiang Jun Xie Lu-You

(Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics and Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

(Received 14 April 2012; revised manuscript received 27 May 2012)

## Abstract

In this paper, the excitation energy and radiative transition probabilities are calculated for  $2p_{3/2}-2s_{1/2}$  transition in  $W^{65+}$  through  $W^{71+}$  ions, by using GRASP92 package based on the multi-configuration Dirac-Fock method. The present calculations are compared with other theoretical and experimental results [Podpaly et al. 2009 *Phys. Rev. A* **80** 052504], and they are in good agreement each other. Furthermore, the total cross section and the magnetic sublevels cross section for the  $2s_{1/2}-2p_{3/2}$  excitation in  $W^{65+}$  through  $W^{71+}$  ions as well as the polarization of resulting transitional lines are calculated, with a fully relativistic distorted-wave method. Based on the calculation, the variations of the excitation cross sections and polarization with the increase of incident electron energy are discussed systematically.

**Keywords:** highly-charged tungsten ions, electron-impact excitation, transition probabilities, the linear polarization

**PACS:** 34.80.Dp

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274245, 10964010, 11147018), the Major Research Plan of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91126007), the Science-Technology Foundation for Middle-aged and Young Scientist of Gansu Province, China (Grant No. 1107RJYA003), and the Scientific Research Foundation of the Higher Education Institutions of Gansu Province of China.

<sup>†</sup> E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn