

电子与高荷电离子碰撞激发的 扭曲波截面*

方泉玉 蔡蔚 沈智军 李萍 邹宇 徐元光 陈国新

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(1994 年 3 月 15 日收到)

采用我们的“快速”扭曲波方法和程序 MCDW(9), 计算了类氪 Ge^{22+} 27 个精细能级之间 351 个过程的激发截面, 并且与其它理论值进行了比较. 结果表明: 碰撞强度大的过程一般符合在 10% 左右. 但是由于组态混合导致跃迁矩阵元严重抵消而成为相对小的过程以及激发能很小的光学禁戒(电偶极振子强度为零)过程, 其截面(或碰撞强度)对模型细节敏感, 不同作者计算差别较大.

PACC: 3480B

1 引 言

电子与高荷电离子碰撞激发截面(或强度)对于 X 射线激光和激光核聚变研究十分重要, 其中 Ne-like 中 Z 离子(如 Ge^{22+}) 在激光等离子体的动力学过程中有着引人注目的重要性^[1]. 人们不仅关心这些离子基态到激发态的跃迁而且关心激发态之间的过程, 这就使得激发截面的需求量大幅度地增加. 目前实验室很难测到微观的激发截面. 这些值只能依靠理论计算, 因此理论上实现“快速”而有一定精度的计算非常重要. 近几年已经发表了许多电子与离子碰撞激发数据^[2-6]. 我们在一些作者^[6-9]成功经验的基础上, 采用并发展了一套自己的扭曲波理论方法, 基本思想如下:

1. 采用带有分数占据数的平均组态来决定 Hartree-Fock-Slater 自洽势. 用此统一的平均势解径向薛定谔方程, 得到一组单电子轨道波函数(包括束缚的和连续的). 这些波函数彼此正交, 从而避免了不正交带来的种种麻烦, 同时提高计算速度. Hagelstein, Sampson 等人采用该大平均组态决定势的方法, 收到好的效果, 已经发表了大量的计算数据^[5,6].

2. 对于相同的一类跃迁, (即初、末态束缚电子 i, j 和自由电子 a, b 的状态都已确定, 除了入射电子能量 $\epsilon_0 = \epsilon_i + \Delta E$ 依赖于激发能 ΔE 之外, ϵ_i 为散射电子能量.) 径向 Slater 积分

* 国家自然科学基金和国家高技术计划激光领域资助项目.

$$R^{(i)} = \int_0^\infty \int_0^\infty P_c(r') P_b(r') \frac{r_c^i}{r_c^{i+1}} P_c(r) P_d(r) dr dr'$$

随激发能变化是平滑而缓慢的,因此可以通过计算三个激发能下的 Slater 积分,然后内插得到实际激发能下相应的积分值^[9,10].该方法能大大提高批量计算的速度.这里 a, b, c, d 中有两个代表束缚电子,另两个代表连续电子; $r_<, r_>$ 分别为 (r, r') 中较小和较大者.

3. 对高分波碰撞强度的贡献采用进一步的近似方法^[11,12],即光学允许跃迁使用 Coulomb-Bethe 近似,对光学禁戒跃迁,使用下降等比级数近似.

4. 对高荷电的中 Z 离子,在非相对论薛定谔方程中,加入相对论修正项^[13],这等于在完全相对论 Dirac 方程中作如下近似,将相对论性分裂的两个子壳层 ($j = l \pm 1/2$) 的量子数 k 取为平均值 (-1) ,同时忽略小分量.在这种情况下,我们简单修改 Cowan 的 HFR 程序,使径向方程中的势为带有分数占据数 HFS 自洽势,然后用这些径向波函数计算能级和混合系数(即本征值和本征矢).这里,由于相对论修正近似,单电子波函数不是严格正交的,然而对中 Z 离子相对修正项较小,我们仍然作正交处理,而不会带来大的误差.径向轨道波函数精细结构能级以及混合系数,都是理论上得到激发截面所必需的基础物理量.在本文实际计算中采用的能级数值直接由 Grant 程序^[14]得到.

2 基本理论

用 αJ_q 表示 (Z, N) 离子能级状态, Z 为核电荷, N 为束缚电子数, J_q 为离子组态的总角动量, α 为规定该状态的其他量子数.该状态的波函数 $|\alpha J_q\rangle$ 用已知的一组正交基函数(或称纯耦合基函数) $|\beta J_q\rangle$ 展开

$$|\alpha J_q\rangle = \sum_{\beta} C_{\beta\alpha} |\beta J_q\rangle. \quad (1)$$

离子波函数采用 LS 耦合方式,得到的总轨道角动量 L_q 和总自旋 S_q ,再耦合成 J_q , J_q 反映了精细能级结构, $C_{\beta\alpha}$ 为混合系数(或称本征矢).由离子与碰撞电子组成的系统波函数 $|\alpha J_q, j\rangle J\rangle$ 有类似于(1)式的展开

$$|\alpha J_q, j\rangle J\rangle = \sum_{\beta} C_{\beta\alpha} |\beta J_q, j\rangle J\rangle, \quad (2)$$

其中 $j = l \pm 1/2$, l 为碰撞电子的轨道角动量.离子与碰撞电子的角动量为 ij 耦合, ij 耦合可以转换成 LS 耦合

$$|\beta J_q, j\rangle J\rangle = \sum_{LS} t_{ij-LS} |\beta LS\rangle J\rangle, \quad (3)$$

t_{ij-LS} 为转换矩阵元^[13]

$$t_{ij-LS} = \langle (L_q l) L, (S_q \frac{1}{2}) S \rangle J | \langle (L_q S_q) J_q, (l \frac{1}{2}) j \rangle J \rangle. \quad (4)$$

离子从下能级 αJ_q 激发到上能级 $\alpha' J'_q$ 的碰撞强度为^[15]

$$Q_{\alpha\alpha'} = \frac{8}{k_a k_b} \sum_{l, l', b, a, b, j} [J] \left| \sum_{\beta\beta'} C_{\beta\alpha} C_{\beta'\alpha'} \sum_{LS} T_{ij-LS} \langle \beta\beta' \rangle \right|^2, \quad (5)$$

相应地激发截面为

$$\sigma_{aa'} = \frac{1}{k_i^2 [J_q]} Q_{aa'},$$

其中 $[J_q] \equiv 2J_q + 1$ 为初态统计权重, k_i, k_f 分别为入射和散射电子的动能 (Ry), l_a, l_b, j_a, j_b 分别为入射、散射电子轨道角动量和总角动量。这里径向连续函数取振幅归一, 即

$$P_{ai}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(kr + \delta_i),$$

δ_i 为相移因子, T_{ii-LS} 为两个 i_{ii-LS} 转换矩阵元的乘积

$$T_{ii-LS} = [L, S, J_q, j_a]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_q & l_a & L \\ S_q & 1/2 & S \\ J_q & j_a & J \end{Bmatrix} [L, S, J'_q, j_b]^{1/2} \begin{Bmatrix} L'_q & l_b & L \\ S'_q & 1/2 & S \\ J'_q & j_b & J \end{Bmatrix}, \quad (6)$$

$$\langle \beta\beta' \rangle \equiv \langle \beta LS \rangle J | V | \beta' LS \rangle J \quad (7)$$

为基函数跃迁矩阵元

$$V = \sum_{n > m} \frac{1}{|R_n - R_m|}, \quad (8)$$

其中我们忽略相同对称块(离子宇称与总角动量固定)能级之间的“弹性”散射部分(即假定基函数相同的跃迁矩阵元为零, 这种近似对结果影响很小, 约为(1-2)%)。同时, 由于波函数的正交性, 单电子算符矩阵元为零, 因此实际上只要计算双电子算符 $\frac{1}{|R_m - R_n|}$ 跃迁矩阵元。基函数是由单电子波函数的乘积型组合而成, 其中单电子径向波函数满足带有相对论修正的薛定谔方程^[13] (Ry 原子单位)

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_{\text{scf}}(r) - \frac{\alpha^2}{4} [\varepsilon - V_{\text{scf}}(r)]^2 - \frac{\alpha^2}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} (\varepsilon - V_{\text{scf}}(r)) \right]^{-1} \frac{dV_{\text{scf}}(r)}{dr} \left(\frac{1}{P(r)} \frac{dP(r)}{dr} - \frac{1}{r} \right) \right\} P(r) = \varepsilon P(r). \quad (9)$$

该式等号左边第四项为质量-速度修正项, 第五项为 Darwin 修正项, V_{scf} 为在大平均组态下的 HFS 自洽势

$$V_{\text{scf}}(r) = -\frac{2Z}{r} + V_c(r) - \frac{3}{2} \left(\frac{24}{\pi} \rho \right)^{1/3}, \quad (10)$$

$$V_c(r) = \sum_{i=1}^q \omega_i \int_0^\infty \frac{2}{r_2} p_i^2(r_2) dr_2,$$

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{i=1}^q \omega_i P_i^2(r).$$

(10)式等号右边第一项为 Coulomb 势, V_c 为电子在球平均场中感受到的势能, 第三项为 Slater 引入的交换势, ρ 为总的球平均的电子数密度, ω_i 为轨道电子占据数, 在平均组态意义下, 其数值可以是分数。在推导 $\langle \beta\beta' \rangle$ 矩阵元公式中, 我们将角动量积分与径

向 Slater 积分分离^[11],同时作因式分解^[9,10],提出直接碰撞项与交换碰撞项角动量积分的共同部分,从而简化了公式. 对于不同组态跃迁,例如



初、末态离子波函数可以分别写为

$$|LS_{q-1}\overline{LS}_q\rangle LS_q, |LS_{q-1}\overline{LS}'_q\rangle LS'_q,$$

\overline{LS}_m 为第 m 壳层的轨道角动量和自旋, LS_m 为 $\leq m$ 的耦合总轨道角动量和总自旋, \overline{LS}_q 和 LS'_q 分别为作用电子 l_i, l_j, LS_{q-1} 等价于 LS'_q , 表示离子芯部(除作用电子外)总轨道角动量和总自旋. 跃迁矩阵元为

$$\begin{aligned} \langle\beta\beta'\rangle = & \sum_i (-1)^{l'_q+l_i+L} \left\{ \begin{matrix} L_q & l_i & L \\ l_b & L'_q & i \end{matrix} \right\} U_b(L'_q l_i L_q i l_i L'_q) \\ & \cdot \left\{ \delta_{s_q s'_q} R_d^{(q)} + \left[\delta_{s_q s'_q} + 6(-1)^{s'_q+1/2+S} \begin{matrix} S_q & 1/2 & S \\ 1/2 & S'_q & 1 \end{matrix} \right] \right. \\ & \left. \cdot U_b(S'_q, 1/2, S_q, 1, 1/2, S'_q) \right\} R_e^{(q)}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$R_d^{(q)} = \langle l_i \| C^{(q)} \| l_i \rangle \langle l_b \| C^{(q)} \| l_b \rangle R_d^{(q)}, \quad (12)$$

$$R_e^{(q)} = -\frac{[L]}{2} \sum_{\gamma} (-1)^{i+\gamma} \left\{ \begin{matrix} l_i & l_j & i \\ l_b & l_b & \gamma \end{matrix} \right\} \cdot \langle l_i \| C^{(q)} \| l_b \rangle \langle l_b \| C^{(q)} \| l_i \rangle R_e^{(q)}, \quad (13)$$

R_d, R_e 为直接碰撞和交换碰撞的 Slater 积分, $U_b(\dots)$ 为约化矩阵元去掉前一个角动量耦合产生的角因子, 即

$$\langle i_1 i_2 j | C^{(q)} | i_1 i_2 j \rangle = U_b(j_1 j_2 j | j) \langle i_2 | C^{(q)} | i_2 \rangle,$$

$$U_b(j_1 j_2 j | j) = (-1)^{i_1+i_2+i+\pi} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} i_1 & i_2 & j \\ x & j' & j_2 \end{Bmatrix}.$$

(11)式等号右边第三项的因子 6 由交换矩阵元的有效算子^[11]引入, 即

$$4 \langle l_i \| V^{(q)} \| l_i \rangle \langle l_b \| V^{(q)} \| l_b \rangle = 4 \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{3}{2}}.$$

(11)式物理意义是明显的, 等号右边第一项 $\delta_{s_q s'_q} R_d^{(q)}$ 为直接碰撞项对跃迁矩阵元的贡献, 第二和第三项为交换碰撞项的贡献. 对于自旋守恒 ($S_q = S'_q$) 跃迁, $\delta_{s_q s'_q} = 1$ 表明直接碰撞与交换碰撞对 $\langle\beta\beta'\rangle$ 都有贡献. 对于自旋禁戒跃迁, $\delta_{s_q s'_q} = 0$, 只有交换碰撞的贡献. 这里

$$R_d(i) = \int_0^\infty \int_0^\infty P_i(r') P_i(r') \frac{r_i^L}{r_i^{L+1}} P_b(r) P_b(r) dr dr',$$

$$R_e(\gamma) = \int_0^\infty \int_0^\infty P_i(r') P_b(r') \frac{r_i^L}{r_i^{L+1}} P_b(r) P_i(r) dr dr',$$

$R_d^{(q)}, R_e^{(q)}$ 分别为直接碰撞和交换碰撞的 Slater 积分. 一般情况下, 跃迁矩阵元的公式比(11)式复杂一些, 其中包括部分根源系数和更多的角动量再耦合系数. 对于相同组态(具有相同壳层轨道和占据数 $\{l_i^{\nu_i}\} (i=1, q)$) 跃迁, 例如 $2p^23p^3P_1 \rightarrow 2p^23p^1D_2$ 初、末态离子

波函数可以分别表示为

$$|\cdots \bar{L}S_{q-1}\rangle LS_{q-1} \bar{L}S_q \rangle LS_q \rangle, |\cdots \bar{L}S_{q-1}\rangle LS_{q-1} \bar{L}S_q \rangle LS'_q \rangle,$$

作用电子 l_i, l_j 可以出现在 $(q-1)$ 和 q 壳层上. 在这种情况下, 引入 $U^{(0)}, V^{(0)}$ 矩阵可以节约 CPU 时间, 其跃迁矩阵元可以表示为

$$\begin{aligned} \langle \beta\beta' \rangle = & \sum_i \sum_j (-1)^{L'_q+l_i+L} \begin{Bmatrix} L_q & l_i & L \\ l_b & L'_q & i \end{Bmatrix} U_b(L_{i-1}, \bar{L}_i, L_i, i, \bar{L}_i, L_i) \\ & \cdot \left\{ \delta s_q s'_q \langle l_i^{\alpha} \bar{L}S_i | | U^{(0)} | | l_i^{\alpha} \bar{L}S'_i \rangle R_d^{(0)} + [\delta s_q s'_q \langle l_i^{\alpha} \bar{L}S_i | | U^{(0)} | | l_i^{\alpha} \bar{L}S'_i \rangle \right. \\ & + 4\sqrt{3/2} (-1)^{s'_q+v_2+s} \begin{Bmatrix} S_q & 1/2 & S \\ 1/2 & S'_q & 1 \end{Bmatrix} [\delta_{i_q} + (1 - \delta_{i_q}) \\ & \cdot U_s(S_{q-1}, \bar{S}_q, S_q, 1, S'_{q-1}, S'_q)] \\ & \left. \cdot U_b(S_{i-1}, \bar{S}_i, S_i, 1, \bar{S}_i, S'_i) \langle l_i^{\alpha} \bar{L}S_i | | V^{(0)} | | l_i^{\alpha} \bar{L}S'_i \rangle | R_c^{(0)} \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

除纯交换过程外, 一般情况下交换碰撞项较直接碰撞项收敛快. 当交换碰撞项达到误差要求后, 只计算直接碰撞项, 此时相应于(5), (11), (14)式的碰撞强度和跃迁矩阵元可以进一步简化为

$$\rho = \frac{8}{k_a k_b} \sum_{i_a, i_b, i_a', i_b'} [J] \left| \sum_{\beta\beta'} C_{\beta\alpha} C_{\beta'\alpha'} \langle \beta\beta' \rangle \right|^2, \quad (5)'$$

$$\langle \beta\beta' \rangle = \delta s_q s'_q \left[\sum_i X^{(0)} (-1)^{L'_q+l_i+L} \begin{Bmatrix} L_q & l_i & L \\ l_b & L'_q & i \end{Bmatrix} R_d^{(0)} \right], \quad (11)'$$

$$\langle \beta\beta' \rangle = \delta s_q s'_q \sum_i \left\{ \sum_j X^{(0)} U_b(L_{i-1}, \bar{L}_i, L_i, i, \bar{L}_i, L_i) \langle l_i^{\alpha} \bar{L}S_i | | U^{(0)} | | l_i^{\alpha} \bar{L}S'_i \rangle R_d^{(0)} \right\}, \quad (14)'$$

其中

$$\begin{aligned} X^{(0)} = & \sum_{LS} T_{ji-LS} (-1)^{L'_q+l_i+L} \begin{Bmatrix} L_q & l_i & L \\ l_b & L'_q & i \end{Bmatrix} \\ = & (-1)^{j'_q+i_a+j} \begin{Bmatrix} J_q & j_i & J \\ j_b & J'_q & i \end{Bmatrix} U_s \left(l_i, \frac{1}{2}, j_i, l_b, j_b \right) U_s(L_q, S_q, J_q, i, L'_q, J'_q), \end{aligned} \quad (15)$$

$$U_s(j_1 j_2 j_3 j'_1 j'_2) = (-1)^{j_1+j_2+j'_1+j'_2} [j, j']^{v_2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j' & j' & i \end{Bmatrix},$$

$U_s(\cdots)$ 为约化矩阵元去掉后一个角动量耦合产生的角因子.

3 计算结果与讨论

用 MCDW(9) 程序计算了 Ge^{22+} 离子 27 个精细能级间激发跃迁的碰撞强度, 其中涉及 4 个组态 $2p^6, 2p^5 3s, 3p, 3d$ 和 一个大平均组态 $2p^5 3s^0, 43p^0, 33d^0, 3$. 该平均组态只用来产生 HFS 势. 4 个组态构成 27 个精细结构能级, 能级能量是由 Grant^[14] 程序计算的. 它们分别属于 9 个对称块:

| | | | | | | | | | |
|-------|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| K | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
| π | + | + | + | + | - | - | - | - | - |
| J | 0 | 1 | 2 | 3 | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |

每个对称块中,基函数 β 个数与能级 α 个数相同。我们用 LSJ 耦合表示能级状态,即首先用 LSJ 耦合表示纯耦合基函数 β 的状态,然后规定用最大(或次大)混合系数相应的 β 状态表示 α 能级状态。当然,实际上的 α 能级往往是由几个纯耦合 β 态混合的一种状态。表 1 给出能级次序、该能级所在的对称块、能级状态以及能量状态。

表 1 Ge^{2+} 离子 $n \leq 3$ 的 27 个精细能级

| 能级号 | 对称块号 (K) | 能级标识 | 能量 | 能级号 | 对称块号 (K) | 能级标识 | 能量 |
|-----|-------------|--------------|--------|-----|-------------|--------------|---------|
| 1 | 1 | $2p^4S_0$ | 0 | | | | |
| 2 | 7 | $2p^3s^3P_2$ | 90.683 | 15 | 1 | $2p^3p^1S_0$ | 98.015 |
| 3 | 6 | $2p^3s^1P_1$ | 90.882 | 16 | 5 | $2p^3d^3P_0$ | 98.531 |
| 4 | 5 | $2p^3s^3P_0$ | 93.068 | 17 | 6 | $2p^3d^3P_1$ | 98.660 |
| 5 | 6 | $2p^3s^3P_1$ | 93.176 | 18 | 9 | $2p^3d^3F_1$ | 98.884 |
| 6 | 2 | $2p^3p^1S_1$ | 93.830 | 19 | 7 | $2p^3d^3P_2$ | 98.900 |
| 7 | 3 | $2p^3p^1D_2$ | 94.076 | 20 | 8 | $2p^3d^3F_3$ | 98.917 |
| 8 | 4 | $2p^3p^1D_3$ | 94.521 | 21 | 7 | $2p^3d^1D_2$ | 99.119 |
| 9 | 2 | $2p^3p^1P_1$ | 94.580 | 22 | 8 | $2p^3d^3D_3$ | 99.268 |
| 10 | 3 | $2p^3p^3P_2$ | 94.818 | 23 | 6 | $2p^3d^3D_1$ | 99.903 |
| 11 | 1 | $2p^3p^3P_0$ | 95.663 | 24 | 7 | $2p^3d^3F_2$ | 101.276 |
| 12 | 2 | $2p^3p^3D_1$ | 96.386 | 25 | 7 | $2p^3d^3D_2$ | 101.400 |
| 13 | 2 | $2p^3p^3P_1$ | 96.978 | 26 | 8 | $2p^3d^1F_3$ | 101.485 |
| 14 | 3 | $2p^3p^1D_1$ | 97.045 | 27 | 6 | $2p^3d^1P_1$ | 102.101 |

我们可以将(5)式碰撞强度写为分波碰撞强度之和,即

$$Q = \sum_{l_s} Q_{l_s} \quad (l_s = 0, 1, 2, \dots),$$

分波截断到 $l_{s,max}$ 。当 $l_s < 20$ 时,用扭曲波方法仔细计算。当 $20 \leq l_s < l_{s,max}$ 时,用 Coulomb 波函数代替扭曲波函数。当 $l_s > l_{s,max}$ 时,用高分波 Coulomb-Bethe 近似(对于光学允许跃迁)或者下降等比级数近似(对于光学禁戒跃迁)^[11,12]。本文实际计算的最小分波数为9(分波提前到 $l_s = N$ 截断时,它的截断误差小于千分之一,即

$$\eta = \frac{Q_N}{\sum_{l_s=0}^N Q_{l_s}} < 0.1\%,$$

最大分波数为 65。

对于基态到激发态的跃迁, Zhang 和 Sampson 等人^[1]1989 年发表了用完全相对论扭曲波的方法计算的 15 个组态 ($2p^6, 2p^23s, 3p, 3d; 2s2p^63s, 3p, 3d; 2p^24s, 4p, 4d, 4f; 2szp^64s, 4p, 4d, 4f$) 的 Ne-like Ge 离子碰撞强度(没有激发态之间跃迁的数据)。Bhatia 等人^[2]1985 年发表了用非相对论扭曲波方法计算的 4 个组态 ($2p^6, 2p^23s, 3p, 3d$) 的 Ne-like Ge 离子碰撞强度,只有一个人射电子能量为 110Ry 的数据。我们与 Zhang 等人数据差别较大的都在最低与最高电子能量(即第一和第六点)上,因此表 2 给出这两点上的

碰撞强度,最后一列给出 Bhatia 等人的数据,其中 E' 是以 Z_{eff}^2 为单位的散射电子能量,即散射电子能量为 $k_i^2 = E'Z_{eff}^2$, $Z_{eff} = Z - 7.5$. 比较结果表明,本文数据与 Zhang 等人的数据以及与 Bhatia 等人的数据符合都在 10% 左右. 图 1 给出基态到激发态 4 种跃迁过程碰撞强度随能量 E' 的变化. 一般情况下,当入射电子能量 ϵ 很高时,按照 Bethe 近似^[16],光学禁戒跃迁的碰撞强度不随 ϵ 变化,光学允许跃迁的碰撞强度随 ϵ 对数上升. 但是当电偶极振子强度很小时,例如 $2p^61S_0 \rightarrow 2p^53d^1P_1$, 电偶极振子强度 $gf = 0.804 \times 10^{-2}$, 该过程初、末主要离子组态自旋不同,以交换碰撞为主,因而它的总体图象与纯交换过程基本相同,即 Q 随 ϵ 增加而下降.

表 2 Ge^{22+} 离子基态到激发态的碰撞强度

| 上能级号 | E' | | | | |
|------|---------------------|--------------------|---------------------|--------------------|--------------------|
| | 0.008 ¹⁾ | 0.75 ¹⁾ | 0.008 ²⁾ | 0.75 ²⁾ | 0.02 ³⁾ |
| 2 | 0.906(-3) | 0.100(-3) | 0.989(-3) | 0.108(-3) | 0.903(-3) |
| 3 | 0.986(-3) | 0.607(-2) | 0.109(-2) | 0.651(-2) | 0.113(-2) |
| 4 | 0.180(-3) | 0.199(-4) | 0.193(-3) | 0.216(-4) | 0.180(-3) |
| 5 | 0.859(-3) | 0.424(-2) | 0.901(-3) | 0.422(-2) | 0.976(-3) |
| 6 | 0.201(-2) | 0.211(-3) | 0.230(-2) | 0.243(-3) | 0.193(-2) |
| 7 | 0.221(-2) | 0.203(-2) | 0.238(-2) | 0.236(-2) | 0.204(-2) |
| 8 | 0.283(-2) | 0.233(-3) | 0.286(-2) | 0.230(-3) | 0.268(-2) |
| 9 | 0.119(-2) | 0.101(-3) | 0.120(-2) | 0.988(-4) | 0.111(-2) |
| 10 | 0.183(-2) | 0.206(-2) | 0.189(-2) | 0.222(-2) | 0.165(-2) |
| 11 | 0.502(-2) | 0.564(-2) | 0.511(-2) | 0.599(-2) | 0.437(-2) |
| 12 | 0.112(-2) | 0.889(-4) | 0.114(-2) | 0.915(-4) | 0.109(-2) |
| 13 | 0.122(-2) | 0.106(-3) | 0.129(-2) | 0.114(-3) | 0.113(-2) |
| 14 | 0.217(-2) | 0.228(-2) | 0.220(-2) | 0.232(-2) | 0.198(-2) |
| 15 | 0.252(-1) | 0.298(-1) | 0.232(-1) | 0.283(-1) | 0.256(-1) |
| 16 | 0.127(-2) | 0.862(-4) | 0.133(-2) | 0.905(-4) | 0.123(-2) |
| 17 | 0.360(-2) | 0.815(-3) | 0.381(-2) | 0.922(-3) | 0.345(-2) |
| 18 | 0.439(-2) | 0.241(-3) | 0.446(-2) | 0.243(-3) | 0.434(-2) |
| 19 | 0.431(-2) | 0.271(-3) | 0.451(-2) | 0.282(-3) | 0.416(-2) |
| 20 | 0.303(-2) | 0.188(-2) | 0.310(-2) | 0.194(-2) | 0.279(-2) |
| 21 | 0.183(-2) | 0.763(-4) | 0.182(-2) | 0.748(-4) | 0.189(-2) |
| 22 | 0.214(-2) | 0.178(-2) | 0.215(-2) | 0.183(-2) | 0.192(-2) |
| 23 | 0.282(-1) | 0.800(-1) | 0.286(-1) | 0.846(-1) | 0.255(-1) |
| 24 | 0.212(-2) | 0.107(-3) | 0.212(-2) | 0.109(-3) | 0.212(-2) |
| 25 | 0.314(-2) | 0.182(-3) | 0.310(-2) | 0.177(-3) | 0.310(-2) |
| 26 | 0.268(-2) | 0.206(-2) | 0.262(-2) | 0.201(-2) | 0.244(-2) |
| 27 | 0.510(-1) | 0.149(0) | 0.484(-1) | 0.147(0) | 0.517(-1) |

1) 为本文结果; 2) 为 Zhang 的结果^[12]; 3) 为 Bhatia 的结果^[13].

对于激发态之间的跃迁, Hagelstein 等人^[6]1987 年发表了用完全相对论扭曲波的方法计算的 7 个组态 ($2p^6; 2p^53s, 3p, 3d; 2s2p^63s, 3p, 3d$) Ne-like Se 离子的碰撞强度. 为了与 Ne-like Ge 离子碰撞强度比较, 需要将 Se^{24+} 离子碰撞强度按 $Z^{*2}Q$ 规律近似推到 Ge^{22+} 上, 即将 Se^{24+} 的 Q 提高 $\left[\left(\frac{25}{23}\right)^2 - 1\right] = 18\%$, 然后与我们的数据进行比较.

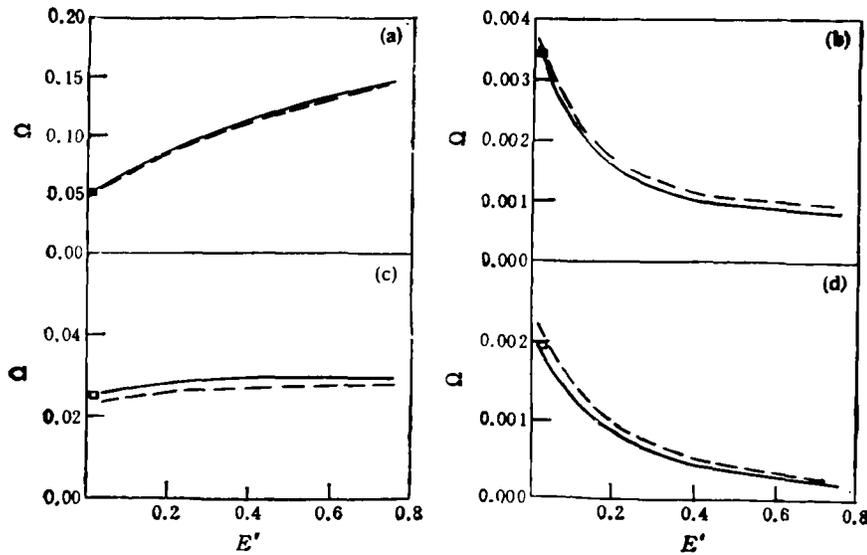


图 1 基态到激发态跃迁的碰撞强度随能量 E' 的变化 实线为本文结果；虚线为 Zhang 的结果；矩形为 Bhatia 的结果；(a) 为 $2p^4S_0 \rightarrow 2p^3d^1P_1$ 跃迁；(b) 为 $2p^4S_0 \rightarrow 2p^3d^3P_1$ 跃迁；(c) 为 $2p^4S_0 \rightarrow 2p^3p^1S_0$ 跃迁；(d) 为 $2p^4S_0 \rightarrow 2p^3p^1S_1$ 跃迁

表 3 给出在光学允许跃迁中, $Q \geq 1$ 的最大激发过程的碰撞强度。总的看来, 标度以后本文数据与 Hagelstein 等人的数据符合在 10% 左右, Bhatia 等人的数据略偏高。但是能级 2 到 7 跃迁我们的结果与 Bhatia 等人的数据一致, 而 Hagelstein 等人的数据只是

表 3 光学允许跃迁最大的碰撞激发过程 ($Q \geq 1$)

| 初态能级号 | 末态能级号 | E' | | | | | | |
|-------|-------|---------------------|--------------------|--------------------|----------------------|---------------------|---------------------|--------------------|
| | | 0.008 ¹⁾ | 0.21 ¹⁾ | 0.41 ¹⁾ | 0.0105 ²⁾ | 0.251 ²⁾ | 0.419 ²⁾ | 0.18 ³⁾ |
| 2 | 6 | 1.12 | 1.78 | 2.04 | 0.92 | 1.63 | 1.74 | 1.93 |
| 2 | 7 | 0.89 | 1.40 | 1.61 | 0.45 | 0.72 | 0.74 | 1.52 |
| 2 | 8 | 2.49 | 3.89 | 4.50 | 2.01 | 3.40 | 3.68 | 4.30 |
| 2 | 10 | 0.89 | 1.38 | 1.59 | 0.78 | 1.29 | 1.41 | 1.53 |
| 3 | 7 | 0.97 | 1.54 | 1.77 | 0.75 | 1.31 | 1.41 | 1.69 |
| 3 | 9 | 1.04 | 1.63 | 1.88 | 0.87 | 1.48 | 1.61 | 1.80 |
| 3 | 10 | 0.85 | 1.33 | 1.54 | 0.71 | 1.19 | 1.29 | 1.47 |
| 4 | 13 | 0.67 | 1.06 | 1.22 | 0.60 | 1.01 | 1.09 | 1.16 |
| 5 | 12 | 0.71 | 1.12 | 1.28 | 0.57 | 1.01 | 1.09 | 1.22 |
| 5 | 14 | 1.77 | 2.76 | 3.19 | 1.44 | 2.43 | 2.57 | 3.05 |
| 6 | 17 | 0.65 | 1.01 | 1.16 | 0.58 | 0.91 | 1.00 | 1.08 |
| 7 | 20 | 1.76 | 2.74 | 3.13 | 1.49 | 2.39 | 2.62 | 3.06 |
| 8 | 18 | 2.80 | 4.35 | 5.01 | 2.35 | 3.85 | 4.19 | 4.86 |
| 9 | 21 | 0.99 | 1.54 | 1.77 | 0.86 | 1.39 | 1.52 | 1.80 |
| 10 | 19 | 0.64 | 0.99 | 1.14 | 0.56 | 0.92 | 1.00 | 1.08 |
| 10 | 22 | 1.76 | 2.73 | 3.14 | 1.49 | 2.44 | 2.67 | 3.06 |
| 12 | 24 | 1.26 | 1.96 | 2.23 | 1.06 | 1.69 | 1.85 | 2.19 |
| 13 | 25 | 1.37 | 2.12 | 2.45 | 1.18 | 1.94 | 2.11 | 0.51 |
| 14 | 26 | 2.17 | 3.37 | 3.87 | 1.82 | 2.97 | 3.25 | 3.77 |

1) 为本文结果; 2) 为 Hagelstein 的结果^[6]; 3) 为 Bhatia 的结果^[3].

我们的二分之一; 13 到 25 跃迁我们的结果与 Hagelstein 等人的数据一致, 而 Bhatia 等人的数据只是我们的四分之一; 这种差别需要进一步探讨。

表 4 给出在光学允许跃迁中, $0.05 \leq Q \leq 1$ 较大激发过程的碰撞强度, 其中大部分标度以后, 本文数据与 Hagelstein 等人的数据符合在 10% 左右, Bhatia 等人的数据偏高一些。但是能级 3—15, 5—11, 6—19, 6—21 之间的跃迁, 本文数据与 Hagelstein 等人的数据相差 40% 左右, 其原因是组态混合引起的相消效应。下面示出在对称块 $K = 6$ ($J^{\pi} = 1^{-}$) 和 $K = 1$ ($J^{\pi} = 0^{+}$) 中有严重混合的能级的主要混合系数:

| K = 6 | | | | K = 1 | | | |
|---------|-----------|---------|----------|---------|-----------|----------|---------|
| β | 状态 | 能级 3 | 能级 5 | β | 状态 | 能级 11 | 能级 15 |
| 1 | $3s^1P_1$ | 0.77916 | -0.62522 | 2 | $3p^1P_0$ | 0.91748 | 0.39778 |
| 2 | $3s^3P_1$ | 0.62606 | 0.77964 | 3 | $3p^1S_0$ | -0.39773 | 0.91737 |

这里 β 状态的次序与 α 能级状态的次序相同。在这两个对称块中激发过程的碰撞强度分别为

$$\begin{array}{cccc}
 \alpha-\alpha' & 3-11 & 3-15 & 5-11 & 5-15 \\
 Q_{\alpha\alpha'} & 0.268 & 0.0714 & 0.0779 & 0.276
 \end{array}$$

如果令 $C_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha}$, $C_{\beta'\alpha'} = \delta_{\beta'\alpha'}$, 通过计算可以得到纯耦合态跃迁的碰撞强度 $Q_{\beta\beta'}$ 。这里 $\delta_{\beta\alpha}$ 等于 1 或 0, 分别表示 β 状态与 α 状态相同或不同的情况。为了简单估计纯耦合态跃迁矩阵元, 令

$$\langle \beta\beta' \rangle = \pm Q_{\beta\beta'}^{1/2},$$

于是得到

$$\begin{array}{ccccc}
 \beta-\beta' & 1-2 & 1-3 & 2-2 & 2-3 \\
 Q_{\beta\beta'} & 0.678^{-3} & 0.287 & 0.396 & 0.678^{-3} \\
 \langle \beta\beta' \rangle & \sim 0 & (0.287)^{1/2} & (0.396)^{1/2} & \sim 0,
 \end{array}$$

$$Q_{\alpha\alpha'} = \left| \sum_{\beta\beta'} C_{\beta\alpha} C_{\beta'\alpha'} \langle \beta\beta' \rangle \right|^2 \sim [|C_{\beta=1,\alpha} C_{\beta'=3,\alpha'} \langle 13 \rangle| \pm |C_{\beta=2,\alpha} C_{\beta'=2,\alpha'} \langle 22 \rangle|]^2, \quad (16)$$

这里 $\alpha-\alpha' = 3-11, 5-15$, 它们的碰撞强度 $Q_{\alpha\alpha'}$ 为上述粗估公式中两项相加的结果。 Q 值较大, 我们称这些过程为对称块中相对大的过程。相应的碰撞强度计算误差较小, 基本保持纯耦合态跃迁的计算精度。而 $\alpha-\alpha' = 3-15, 5-11$, 它们的碰撞强度则是上式两项相减的结果。 Q 值较小, 我们称它们为对称块中相对小的过程。在该过程中, 由于基函数混合而产生的相消效应, 使得碰撞强度计算误差比纯耦合计算误差扩大, 其精度水平下降。类似地在 $K = 2, \alpha = 6, 9, 12, 13$, 与 $K' = 7, \alpha' = 19, 21, 24, 25$ 之间的激发跃迁中, 相对大的过程, $\alpha-\alpha' = 13-25, 12-24, 9-21$, 它们的碰撞强度计算误差较小, 而相对小的过程, $\alpha-\alpha' = 6-19, 9-19, 6-21, 13-24, \dots$, 其中有一些由于相消效应而使碰撞强度计算误差增加。表 4 中能级 3—15, 5—11, 6—19, 6—21 之间跃迁, 就是由于这种原因造成本文数据与 Hagelstein 等人的数据相差较大 ($\sim 40\%$)。

表 5 给出在光学禁戒跃迁中, $Q \geq 0.05$ 较大激发过程的碰撞强度。大部分数据彼此符合很好。本文数据与 Hagelstein 等人的数据相差 10% 左右。但是 8—10, 9—10, 18—22, 19—22, 20—21 过程的碰撞强度, 本文数据与 Hagelstein 等人的数据相差 2 至

表 4 光学允许跃迁中较大的碰撞激发过程 ($1 \geq Q \geq 0.05$)

| 初态能级号 | 末态能级号 | E' | | | | | | | |
|-------|-------|------------|---------------------|--------------------|--------------------|----------------------|---------------------|---------------------|--------------------|
| | | ΔE | 0.008 ¹⁾ | 0.21 ²⁾ | 0.41 ³⁾ | 0.0105 ²⁾ | 0.251 ²⁾ | 0.419 ²⁾ | 0.18 ³⁾ |
| 3 | 11 | 4.781 | 0.268 | 0.419 | 0.478 | 0.254 | 0.401 | 0.443 | 0.464 |
| 3 | 15 | 7.133 | 0.071 | 0.111 | 0.127 | 0.041 | 0.062 | 0.072 | 0.127 |
| 4 | 12 | 3.318 | 0.394 | 0.624 | 0.717 | 0.276 | 0.485 | 0.521 | 0.688 |
| 5 | 11 | 2.487 | 0.078 | 0.127 | 0.144 | 0.041 | 0.051 | 0.049 | 0.136 |
| 5 | 13 | 3.802 | 0.370 | 0.573 | 0.662 | 0.314 | 0.525 | 0.568 | 0.638 |
| 6 | 16 | 4.701 | 0.298 | 0.464 | 0.532 | 0.277 | 0.436 | 0.477 | 0.503 |
| 6 | 19 | 5.070 | 0.430 | 0.666 | 0.759 | 0.368 | 0.410 | 0.430 | 0.796 |
| 6 | 21 | 5.289 | 0.093 | 0.140 | 0.159 | 0.077 | 0.084 | 0.088 | 0.110 |
| 7 | 17 | 4.584 | 0.100 | 0.151 | 0.173 | 0.101 | 0.156 | 0.170 | 0.161 |
| 7 | 19 | 4.824 | 0.224 | 0.343 | 0.391 | 0.217 | 0.337 | 0.369 | 0.431 |
| 7 | 21 | 5.043 | 0.404 | 0.624 | 0.710 | 0.347 | 0.539 | 0.593 | 0.646 |
| 8 | 19 | 4.379 | 0.097 | 0.142 | 0.163 | 0.093 | 0.142 | 0.154 | 0.162 |
| 8 | 20 | 4.396 | 0.343 | 0.511 | 0.587 | 0.287 | 0.448 | 0.490 | 0.577 |
| 8 | 22 | 4.747 | 0.402 | 0.611 | 0.697 | 0.364 | 0.568 | 0.621 | 0.689 |
| 9 | 19 | 4.320 | 0.169 | 0.257 | 0.296 | 0.127 | 0.203 | 0.220 | 0.285 |
| 9 | 23 | 5.323 | 0.351 | 0.547 | 0.621 | 0.331 | 0.513 | 0.566 | 0.581 |
| 10 | 17 | 3.842 | 0.137 | 0.210 | 0.241 | 0.117 | 0.193 | 0.208 | 0.235 |
| 10 | 20 | 4.099 | 0.047 | 0.063 | 0.071 | 0.041 | 0.058 | 0.063 | 0.073 |
| 10 | 21 | 4.301 | 0.045 | 0.058 | 0.065 | 0.046 | 0.064 | 0.064 | 0.092 |
| 11 | 23 | 4.240 | 0.473 | 0.740 | 0.853 | 0.414 | 0.687 | 0.747 | 0.666 |
| 12 | 27 | 5.715 | 0.237 | 0.366 | 0.414 | 0.242 | 0.367 | 0.404 | 0.407 |
| 13 | 24 | 4.298 | 0.047 | 0.066 | 0.075 | 0.037 | 0.054 | 0.059 | 0.067 |
| 14 | 24 | 4.231 | 0.238 | 0.350 | 0.401 | 0.208 | 0.324 | 0.353 | 0.402 |
| 14 | 25 | 4.355 | 0.182 | 0.266 | 0.304 | 0.163 | 0.250 | 0.272 | 0.299 |
| 15 | 27 | 4.086 | 0.463 | 0.725 | 0.835 | 0.415 | 0.685 | 0.743 | 0.812 |

1) 为本文结果; 2) 为 Hagelstein 的结果^[6]; 3) 为 Bhatia 的结果^[7].

3 倍, 而与 Bhatia 等人的数据相差较小。这 5 个过程的共同特征是它们激发能很小 ($\delta E < 0.4Ry$), 分波收敛很慢, 例如第六个能量点 ($E' = 0.75$) 的分波, 我们计算到 65, 然后作高分波 (即等比下降级数) 近似。这种激发能很小的过程, 碰撞强度计算对模型细节敏感, 不容易算准。同时, Se 数据外推到 Ge 上, 也存在较大误差, 以致造成本文数据与 Hagelstein 等人的数据差别很大。

在 27 个精细能级中, 基本上没有混合的纯耦合态有 6 个, 它们的能级、状态如下:

| | | | | | | |
|----|-------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 能级 | 1 | 2 | 4 | 8 | 16 | 18 |
| 状态 | $2p^6^1S_0$ | $3s^3P_2$ | $3s^3P_0$ | $3p^3D_3$ | $3d^3P_0$ | $3d^3F_4$ |

这些纯耦合态能级之间跃迁有 15 个, 5 个是从基态到激发态, 它们的碰撞强度列于表 2, 10 个是从激发态到激发态, 表 6 给出这 10 个跃迁的碰撞强度。从这些耦合态之间跃迁的碰撞强度可以看出, 除了极小过程 ($Q < 10^{-3}$ 在计算误差范围内) 外, 其余过程 ($Q > 10^{-3}$) 与本文数据、Hagelstein 等人的数据以及 Bhatia 等人的数据符合很好, 都在 10% 以内。

图 2 给出激发态之间 8 种跃迁过程的碰撞强度随能量 E' 变化的情况。可以看出, 本

表5 光学禁戒跃迁较大的碰撞激发过程 ($Q \geq 0.05$)

| 初态能级号 | 末态能级号 | E' | | | | | | | |
|-------|-------|------------|---------------------|--------------------|--------------------|----------------------|---------------------|---------------------|--------------------|
| | | ΔE | 0.008 ¹⁾ | 0.21 ¹⁾ | 0.41 ¹⁾ | 0.0105 ²⁾ | 0.251 ²⁾ | 0.419 ²⁾ | 0.18 ³⁾ |
| 2 | 17 | 7.977 | 0.047 | 0.052 | 0.053 | 0.041 | 0.045 | 0.045 | 0.039 |
| 2 | 18 | 8.201 | 0.142 | 0.159 | 0.161 | 0.131 | 0.139 | 0.141 | 0.117 |
| 2 | 19 | 8.217 | 0.070 | 0.077 | 0.078 | 0.062 | 0.069 | 0.070 | 0.059 |
| 2 | 20 | 8.234 | 0.055 | 0.056 | 0.056 | 0.056 | 0.048 | 0.049 | 0.046 |
| 2 | 22 | 8.585 | 0.064 | 0.067 | 0.068 | 0.059 | 0.060 | 0.061 | 0.053 |
| 3 | 20 | 8.035 | 0.062 | 0.068 | 0.069 | 0.056 | 0.060 | 0.061 | 0.051 |
| 3 | 21 | 8.237 | 0.065 | 0.075 | 0.076 | 0.060 | 0.066 | 0.068 | 0.056 |
| 3 | 22 | 8.386 | 0.050 | 0.055 | 0.056 | 0.046 | 0.049 | 0.049 | 0.041 |
| 3 | 23 | 9.021 | 0.042 | 0.050 | 0.051 | 0.037 | 0.043 | 0.044 | 0.034 |
| 5 | 26 | 8.309 | 0.111 | 0.122 | 0.123 | 0.103 | 0.109 | 0.112 | 0.092 |
| 5 | 27 | 8.925 | 0.045 | 0.051 | 0.052 | 0.040 | 0.044 | 0.045 | 0.037 |
| 6 | 8 | 0.691 | 0.119 | 0.107 | 0.106 | 0.113 | 0.105 | 0.106 | 0.095 |
| 7 | 8 | 0.445 | 0.087 | 0.066 | 0.064 | 0.074 | 0.057 | 0.056 | 0.070 |
| 7 | 9 | 0.504 | 0.073 | 0.064 | 0.063 | 0.051 | 0.044 | 0.044 | 0.059 |
| 7 | 10 | 0.742 | 0.098 | 0.086 | 0.086 | 0.084 | 0.074 | 0.074 | 0.080 |
| 8 | 10 | 0.297 | 0.131 | 0.113 | 0.111 | 0.076 | 0.046 | 0.043 | 0.109 |
| 9 | 10 | 0.238 | 0.079 | 0.069 | 0.068 | 0.052 | 0.034 | 0.032 | 0.066 |
| 12 | 13 | 0.592 | 0.083 | 0.075 | 0.074 | 0.070 | 0.063 | 0.064 | 0.066 |
| 18 | 22 | 0.384 | 0.129 | 0.095 | 0.093 | 0.082 | 0.031 | 0.026 | 0.116 |
| 19 | 22 | 0.368 | 0.094 | 0.065 | 0.062 | 0.048 | 0.034 | 0.033 | 0.080 |
| 20 | 21 | 0.202 | 0.100 | 0.075 | 0.073 | 0.042 | 0.027 | 0.026 | 0.085 |

1) 为本文结果; 2) 为 Hagelstein 的结果^[2]; 3) 为 Bhatia 的结果^[3].

表6 “纯耦合态”之间的跃迁过程

| 初态能级号 | 末态能级号 | E' | | | | | | | |
|-------|-------|------------|---------------------|--------------------|--------------------|----------------------|---------------------|---------------------|--------------------|
| | | ΔE | 0.008 ¹⁾ | 0.21 ¹⁾ | 0.41 ¹⁾ | 0.0105 ²⁾ | 0.251 ²⁾ | 0.419 ²⁾ | 0.18 ³⁾ |
| 2 | 4 | 2.385 | 0.732(-2) | 0.549(-2) | 0.524(-2) | 0.674(-2) | 0.525(-2) | 0.512(-2) | 0.690(-2) |
| 2 | 8 | 3.838 | 2.486 | 3.893 | 4.497 | 2.01 | 3.40 | 3.68 | 4.3 |
| 2 | 16 | 7.848 | 0.163(-1) | 0.181(-1) | 0.184(-1) | 0.138(-1) | 0.151(-1) | 0.153(-1) | 0.135(-1) |
| 2 | 18 | 8.201 | 0.142 | 0.159 | 0.161 | 0.131 | 0.139 | 0.141 | 0.117 |
| 4 | 8 | 1.453 | 0.776(-6) | 0.915(-6) | 0.102(-5) | 0.130(-5) | 0.158(-5) | 0.173(-5) | 0.170(-4) |
| 4 | 16 | 5.463 | 0.310(-5) | 0.239(-5) | 0.224(-5) | 0 | 0 | 0 | 0.400(-5) |
| 4 | 18 | 5.816 | 0.873(-6) | 0.400(-6) | 0.424(-6) | 0.145(-5) | 0.673(-6) | 0.719(-6) | 0.300(-5) |
| 8 | 16 | 4.010 | 0.358(-2) | 0.411(-2) | 0.455(-2) | 0.314(-2) | 0.372(-2) | 0.406(-2) | 0.317(-2) |
| 8 | 18 | 4.363 | 2.802 | 4.353 | 5.013 | 2.35 | 3.85 | 4.19 | 4.86 |
| 16 | 18 | 0.353 | 0.421(-2) | 0.179(-2) | 0.189(-2) | 0.361(-2) | 0.157(-2) | 0.168(-2) | 0.379(-2) |

1) 为本文结果; 2) 为 Hagelstein 的结果^[2]; 3) 为 Bhatia 的结果^[3].

文的与 Hagelstein 等人的碰撞强度曲线的变化趋势一致。

以上三种扭曲波方法结果的比较表明, 大部分数据彼此相差 10% 左右。这种差别反映了扭曲波方法计算的基本误差。其产生的原因与分波收敛性(截断或高分波近似), 波函数误差及归一误差, 能级与混合系数误差以及其他数值计算误差有关。对于大过程, 大

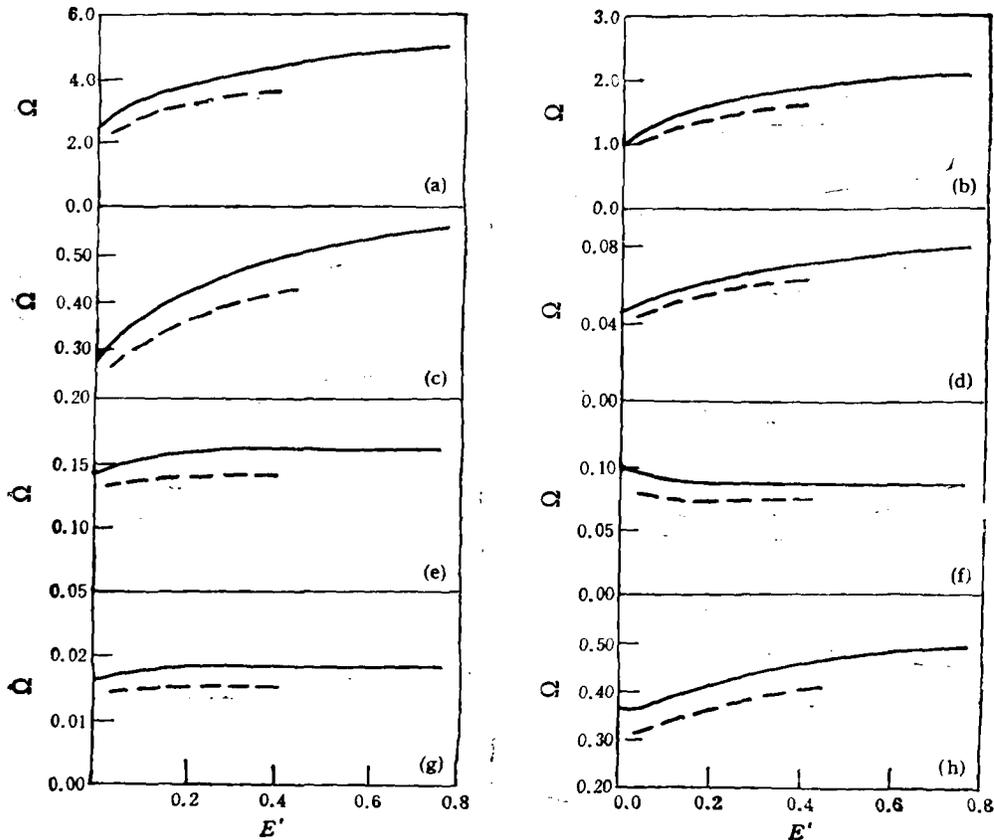


图2 激发态到激发态跃迁的碰撞强度随能量 E' 的变化。实线为本文结果；虚线为 Hagelstein 的结果；矩形为 Bhatia 的结果；(a) 为 $2p^33s^3P_2 \rightarrow 2p^33p^3D_2$ 跃迁；(b) 为 $2p^33s^1P_1 \rightarrow 2p^33p^1P_1$ 跃迁；(c) 为 $2p^33s^3P_1 \rightarrow 2p^33p^3S_1$ 跃迁；(d) 为 $2p^33p^3P_2 \rightarrow 2p^33d^3F_4$ 跃迁；(e) 为 $2p^33s^3P_2 \rightarrow 2p^33d^3F_4$ 跃迁；(f) 为 $2p^33p^3D_2 \rightarrow 2p^33p^3P_2$ 跃迁；(g) 为 $2p^33s^3P_2 \rightarrow 2p^33d^3P_0$ 跃迁；(h) 为 $2p^33p^3D_1 \rightarrow 2p^33d^3P_0$ 跃迁；(a),(b),(c),(d) 为光学允许跃迁；(e),(f) 为光学禁戒跃迁；(g),(h) 为纯耦合跃迁

部分较大过程以及近乎纯耦合态之间较小的碰撞强度，它们对模型细节相当不敏感，其精度大致保持着基本误差 10% 左右。但是在较大过程中，有少部分属于对称块中相对小过程，或者激发能很小的过程，它们的碰撞强度对模型细节相当敏感，不容易算准，其误差可能达到百分之几十甚至几百。总之，本文介绍的扭曲波方法和程序，不仅非常“快速”，且能够较精确地给出大部分重要过程的理论激发截面(或碰撞强度)。对于热等离子体大量的碰撞动力学过程而言，只要能把握住大部分重要过程就不致影响总体物理图象。

- [1] 王世绩等, 强激光与粒子束, 4(1992), 165.
- [2] U. Feldman, A.K. Bhatia and S. Suckewer, *J. Appl. Phys.*, 54(1983), 2188.
- [3] A.K. Bhatia, U. Feldman and J.F. Seely, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 32(1985), 435.
- [4] J.B. Mann, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 29(1983), 407.
- [5] H.L. Zhang and D.H. Sampson, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 43(1989), 1.
- [6] P.L. Hagelstein and R.K. Jung, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 37(1987), 121.
- [7] A. Burgess, D.G. Hummer and J.A. Tully, *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, A266 (1970), 225.
- [8] A. Burgess and J.A. Tully, *J. Phys. B*, 11(1978), 4271.

- [9] D.H. Sampson, Hong Lin Zhang, A.K. Mohanty and R.E.H. Clark, *Phys. Rev.*, **A40**(1989), 604; H.L. Zhang, D.H. Sampson and A.K. Mohanty, *Phys. Rev.*, **A40** (1989), 616.
[10] A. Bar-Shalom, M. Klapisch and J. Oreg, *Phys. Rev.*, **A38**(1988), 1773.
[11] 方泉玉等, 计算物理, **9**(1992), 615.
[12] A. Burgess, *J. Phys. B*, **7**(1974), L364.
[13] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (University of California Press, Berkeley, 1981).
[14] K.G. Dyall *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **55**(1989), 425; *ibid.*, **21**(1980), 207.
[15] 方泉玉等, 强激光与粒子束, **4**(1992), 186.
[16] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.*, **43**(1971), 297.

A DISTORTED-WAVE APPROACH TO ELECTRON IMPACT EXCITATION FOR HIGHLY CHARGED IONS

FANG QUAN-YU CAI WEI SHEN ZHI-JUN LI PING ZOU YU

XU YUAN-GUANG CHEN GUO-XIN

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088*)

(Received 15 March 1994)

ABSTRACT

With our rapid multi-configuration distorted wave (MCDW) method and corresponding code MCDW(9), the excitation cross sections of Ge^{22+} ion by electron impact have been calculated. All the 351 transitions between 27 fine structure levels of Ge^{22+} ion were investigated. The cross sections with large values agree with other theoretical results within 10%. For some of the cross sections with small values, and for optical forbidden transitions with small excitation energies, a relatively large discrepancy exists.

PACC: 3480B