

W⁶⁺离子的电子碰撞电离研究*

马莉莉 张世平 张芳军 李麦娟 蒋军
丁晓彬 颜录有 张登红[†] 董晨钟

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

(2024年3月21日收到; 2024年4月24日收到修改稿)

采用细致能级扭曲波方法计算了 W⁶⁺离子基态 [Kr]4d¹⁰5s²4f¹⁴5p⁶ 和亚稳态 [Kr]4d¹⁰5s²4f¹⁴5p⁵5d¹, [Kr]4d¹⁰5s²4f¹³5p⁶5d¹, [Kr]4d¹⁰5s²4f¹⁴5p⁵5f¹, [Kr]4d¹⁰5s²4f¹³5p⁶5f¹ 的电子碰撞单电离 (EISI) 截面. 为了考虑亚稳态离子对电离的贡献, 本文采用了 3 种模型来确定母离子束中处于长寿命能级的比值. 与 Pindzola 和 Griffin (1997 *Phys. Rev. A* **56** 1654) 的理论结果和 Stenke 等 (1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 2711) 实验结果进行比较, 发现在考虑了亚稳态的贡献后本文结果与 Stenke 等的实验结果吻合得很好.

关键词: 钨离子, 电子碰撞, 亚稳态, 直接电离, 激发自电离

PACS: 34.80.Dp, 34.50.Fa

DOI: 10.7498/aps.73.20240408

1 引言

金属钨具有高熔点、高热导率、低溅射率, 以及低燃料粒子滞留率等优良特性, 被托卡马克磁约束核聚变装置选为面壁材料^[1,2]. 面壁材料长时间与等离子体直接接触, 导致钨原子和离子被溅射并电离到不同的电荷态, 从而进入托卡马克装置成为等离子体杂质. 为了确保稳定的等离子体燃烧条件, 目前正在进行高度复杂的建模, 以评估钨杂质的行为及其对托卡马克等离子体的影响^[3,4]. 这就需要钨原子及其不同离化态离子的各种高精度原子数据^[5,6].

电子碰撞电离作为基本的原子物理过程, 广泛存在于实验室和天体物理等离子体环境中, 其电子碰撞电离截面和速率系数等参数对等离子体辐射输运模拟和状态诊断等至关重要^[7-9]. 在过去的几十年中, 研究者们对 W^{q+}离子的电子碰撞单电离 (EISI) 截面进行了实验测量和理论计算. 实验

方面, 早在 1984 年, Montague 和 Harrison^[10] 使用电子-离子交叉束装置测量了 W⁺离子的 EISI 截面. Rausch 等^[11] 和 Borovik 等^[12] 利用电子-离子交叉束装置分别测量了 W¹⁷⁺和 W¹⁹⁺离子的 EISI 截面. Schury 等^[13] 测量了 W^{q+} (11 ≤ q ≤ 18) 离子的 EISI 截面, 并使用组态平均扭曲波方法 (CADW) 计算了基态的 EISI 截面. Stenke 等^[14] 利用电子-回旋-共振 (ECR) 离子源测量了 W^{q+} (1 ≤ q ≤ 10) 离子的 EISI 截面和多重电离截面. 理论方面, Balance 等^[15] 利用 R 矩阵法和 CADW 方法计算了 W³⁺离子基态的 EISI 截面. Pindzola 和 Griffin^[16] 使用 CADW 方法计算了 W⁴⁺, W⁵⁺和 W⁶⁺离子基态的 EISI 截面, 其中 W⁴⁺和 W⁵⁺离子的 EISI 截面在入射电子能量高于电离阈值时的计算结果与实验测量值吻合地较好. 本课题组^[17,18] 使用细致能级扭曲波 (LLDW) 方法计算了 W⁴⁺, W⁵⁺和 W¹⁷⁺的 EISI 截面. Jin 等^[19,20] 采用 CADW 和 LLDW 混合的方法计算了 W¹⁴⁺—W¹⁶⁺离子的 EISI 截面, 计算结果与 Schury 等^[13] 的实验结果符合得很好. Jonauskas 等^[21] 对 W⁵⁺离子的 EISI 截面进行了实验

* 国家自然科学基金 (批准号: 12364034) 和甘肃省科技计划 (批准号: 23YFFA0074) 资助的课题.

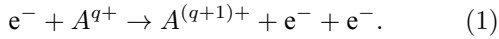
[†] 通信作者. E-mail: zhangdh@nwnu.edu.cn

和理论研究, 研究发现亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^2$ 和 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^2$ 对总 EISI 截面有重要的贡献. Chen 等^[22] 和 Bao 等^[23] 使用 LLDW 计算了 W^{7+} , W^{9+} 和 W^{10+} 离子的 EISI 截面, 强调了亚稳态对总截面有重要的贡献.

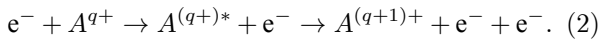
1995 年 Stenke 等^[14] 测量了 W^{6+} 离子的 EISI 截面, 并在低于基态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 电离阈值处观察到了电离信号. 随后, Pindzola 和 Griffin^[16] 使用 CADW 方法计算了 W^{6+} 离子基态的 EISI 截面. 最近, Yan 等^[24] 利用电子束离子阱 (EBIT) 和 FAC (flexible atomic code) 程序包^[25] 研究了 W^{5+} — W^{7+} 的电荷态演化并计算了 W^{6+} 离子的 EISI 截面. 由于没有系统考虑亚稳态离子对总 EISI 截面的影响, 这些理论计算都没能完全重现 Stenke 等^[26] 的实验谱, 最大差异约为 50%. 因此, 本工作将通过 Jonauskas 等^[27] 提出的 3 种模型来预估母离子束中亚稳态离子所占的比值, 确定 W^{6+} 离子亚稳态对总 EISI 截面的贡献, 从而阐明已有理论和实验谱不一致的原因.

2 理论方法

电子碰撞单电离 (EISI) 过程主要包括直接电离 (DI) 和激发自电离 (EA) 过程, DI 过程可以表示为



EA 过程表示为



在独立近似过程下, W^{6+} 离子总的 EISI 截面可以由下式给出:

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{f}}^{\text{DI}} + \sum_j \sigma_j^{\text{CE}} B_j^{\text{a}}, \quad (3)$$

式中 $\sigma_{\text{f}}^{\text{DI}}$ 是 W^{6+} 离子的 DI 截面; σ_j^{CE} 是 W^{6+} 离子

激发至 j 能级的 CE 截面; B_j^{a} 是自电离分支比,

$$B_j^{\text{a}} = \frac{\sum_k A_{jk}^{\text{a}} B_k^{\text{r}} + \sum_s A_{js}^{\text{r}} B_s^{\text{a}}}{\sum_k A_{jk}^{\text{a}} + \sum_s A_{js}^{\text{r}}}, \quad (4)$$

其中 A_{jk}^{a} 是 W^{6+} 从 j 能级到 k 能级的自电离概率, B_k^{r} 是辐射分支比, A_{js}^{r} 是 W^{6+} 从 j 能级到 s 能级的辐射衰变率, B_s^{a} 是自电离分支比.

本文利用基于全相对论多组态 Dirac-Fock 理论方法的 FAC 程序包^[25], 计算了原子能级、辐射衰变率、自电离概率、碰撞激发截面以及电离截面.

3 结果与讨论

3.1 W^{6+} 离子的能级

表 1 列出了计算的 W^{6+} 离子基态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 和激发态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$ 的 5d, 4f, 5p, 5s, 以及 4d 壳层的电离阈值. 我们得到基态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的电离阈值为 118.28 eV, 亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$ 的电离阈值为 81.85 eV, 与 Grand 和 McKenzie^[28] 使用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法计算的结果以及 NIST^[29] 推荐值进行比较, 最大相对差异分别为 0.3% 和 1.5%.

为了评估 W^{6+} 离子实验^[14] 中亚稳态离子对电离截面的贡献, 计算了 W^{6+} 离子相关的亚稳态 $4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$, $4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1$, $4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1$ 和 $4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^1$ 激发能 (eV) 和能级寿命. 实验中离子从离子源到相互作用区域的飞行时间约为 10^{-5} s, 因此, 我们只考虑了亚稳态寿命大于 10^{-5} s 的能级, 并在表 2 中列出了相关能级. 从表 2 可以看出, 共有 59 个长寿命能级, 第 38 个能级其寿命更是达到了 10^4 s.

3.1.1 基态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$

W^{6+} 离子基态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的 DI 通道包

表 1 W^{6+} 离子基态 $5p^6$ 和激发态 $5p^55d^1$ 外壳层电离阈值

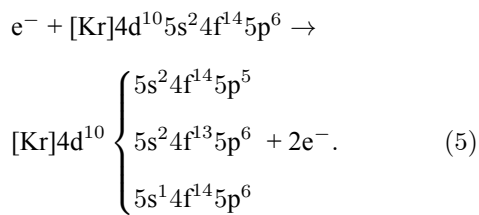
Table 1. Threshold energies for the ionization of electrons in the outer subshells of W^{6+} ion ground state $5p^6$ and excited state $5p^55d^1$.

Configuration	Method	5d	4f	5p	5s	4d
$5p^6$	FAC		118.28	120.19	166.43	334.88
	MCDF ^[28]		119.0	120.6	166.8	335.9
	NIST ^[29]		122.01 ± 0.06	122.11 ± 0.06		
$5p^55d^1$	FAC	81.85	120.45	122.14	164.24	
	MCDF ^[28]	81.95	120.9	122.4	164.2	

表 2 W^{6+} 离子的长寿命能级 (大于 10^{-5} s) 和寿命 ($a \pm b \equiv a \times 10^{\pm b}$)
 Table 2. Long-lived levels (exceeding 10^{-5} s) and its lifetimes ($a \pm b \equiv a \times 10^{\pm b}$) of the W^{6+} ion.

Configuration	Index	Level	J	Energy/eV	Lifetimes/s	Configuration	Index	Level	J	Energy/eV	Lifetimes/s	
$5p^6$	0	$5p_+^4$	0	0	—	$4f^{13}5d^1$	30	$5p_+^3 5f_+^1$	4	78.81	8.70×10^{-1}	
	1	$4f_+^7 5d_-^1$	2	36.18	2.63×10^{-1}		31	$5p_+^3 5f_+^1$	2	79.10	4.12×10^{-1}	
	2	$4f_+^7 5d_-^1$	3	37.44	2.11×10^{-1}		32	$5p_-^1 5f_-^1$	3	89.54	7.15×10^{-5}	
	3	$4f_+^7 5d_-^1$	4	37.72	3.38×10^{-1}		33	$5p_-^1 5f_+^1$	3	89.61	7.18×10^{-5}	
	4	$4f_+^7 5d_+^1$	6	37.98	6.19×10^{-2}		34	$5p_-^1 5f_+^1$	4	89.70	7.00×10^{-5}	
	5	$4f_+^7 5d_+^1$	2	38.29	2.59×10^{-2}		35	$5p_-^1 5f_+^1$	2	90.00	6.78×10^{-5}	
	6	$4f_+^7 5d_+^1$	4	38.78	1.26×10^{-2}		$4f^{13}5f^1$	36	$4f_+^7 5f_+^1$	1	75.70	$1.23 \times 10^{+2}$
	7	$4f_+^7 5d_+^1$	3	38.94	2.03×10^{-2}			37	$4f_+^7 5f_-^1$	2	75.72	$1.48 \times 10^{+1}$
	8	$4f_+^7 5d_+^1$	5	39.10	2.75×10^{-2}			38	$4f_+^7 5f_-^1$	6	75.77	$1.92 \times 10^{+4}$
	9	$4f_+^7 5d_+^1$	4	39.22	1.10×10^{-2}			39	$4f_+^7 5f_+^1$	3	75.91	$4.47 \times 10^{+1}$
	10	$4f_-^5 5d_+^1$	0	39.41	8.02×10^{-2}			40	$4f_+^7 5f_-^1$	3	76.12	$4.60 \times 10^{+2}$
	11	$4f_-^5 5d_-^1$	2	39.53	5.97×10^{-3}			41	$4f_+^7 5f_-^1$	4	76.13	$6.76 \times 10^{+1}$
	12	$4f_-^5 5d_-^1$	3	40.23	5.14×10^{-2}			42	$4f_+^7 5f_-^1$	5	76.17	$2.11 \times 10^{+1}$
	13	$4f_-^5 5d_+^1$	5	40.52	4.06×10^{-3}			43	$4f_+^7 5f_+^1$	2	76.18	2.97
	14	$4f_-^5 5d_+^1$	2	40.79	4.96×10^{-3}			44	$4f_+^7 5f_+^1$	5	76.20	$2.95 \times 10^{+1}$
	15	$4f_-^5 5d_+^1$	3	41.23	4.39×10^{-3}			45	$4f_+^7 5f_+^1$	6	76.22	$1.67 \times 10^{+1}$
16	$4f_-^5 5d_+^1$	4	41.37	4.69×10^{-3}	46	$4f_+^7 5f_+^1$		4	76.26	$6.77 \times 10^{+1}$		
$4f^{13}5d^1$	17	$5p_+^3 5d_-^1$	1	39.18	$3.16 \times 10^{+1}$	47		$4f_+^7 5f_+^1$	0	76.81	3.36×10^{-2}	
	18	$5p_+^3 5d_-^1$	3	40.64	5.40×10^{-1}	48		$4f_-^5 5f_+^1$	1	77.73	1.31×10^{-2}	
	19	$5p_+^3 5d_-^1$	2	40.69	1.17×10^{-2}	49		$4f_-^5 5f_-^1$	1	78.01	1.19×10^{-2}	
	20	$5p_+^3 5d_-^1$	4	40.88	3.15	50		$4f_-^5 5f_-^1$	5	78.03	1.10×10^{-2}	
	$5p^5 5d^1$	21	$5p_+^3 5d_-^1$	2	41.76	1.11×10^{-2}		51	$4f_-^5 5f_+^1$	6	78.11	1.06×10^{-2}
		22	$5p_+^3 5d_-^1$	3	43.18	7.07×10^{-3}	52	$4f_-^5 5f_+^1$	2	78.16	1.11×10^{-2}	
		23	$5p_-^1 5d_-^1$	2	51.40	4.05×10^{-5}	53	$4f_-^5 5f_+^1$	3	78.31	1.07×10^{-2}	
		24	$5p_-^1 5d_+^1$	2	52.83	4.30×10^{-5}	54	$4f_-^5 5f_-^1$	3	78.40	1.10×10^{-2}	
		25	$5p_-^1 5d_+^1$	3	53.44	3.42×10^{-5}	55	$4f_-^5 5f_-^1$	2	78.44	9.91×10^{-3}	
	$5p^5 5f^1$	26	$5p_+^3 5f_-^1$	2	77.81	2.43	56	$4f_-^5 5f_+^1$	4	78.47	1.07×10^{-2}	
27		$5p_+^3 5f_-^1$	4	78.11	$1.75 \times 10^{+1}$	57	$4f_-^5 5f_-^1$	4	78.50	1.04×10^{-2}		
28		$5p_+^3 5f_+^1$	3	78.31	1.13	58	$4f_-^5 5f_+^1$	5	78.50	1.06×10^{-2}		
29		$5p_+^3 5f_-^1$	3	78.70	9.02×10^{-1}	59	$4f_-^5 5f_-^1$	0	86.47	3.52×10^{-4}		

括 4f, 5s 和 5p 三个壳层, 具体的 DI 过程可以表示为

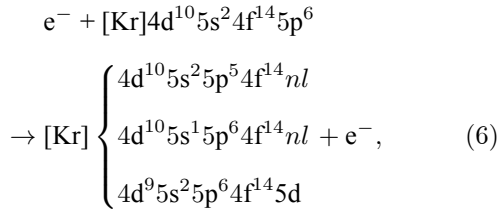


对于更深的 4d 和 4p 壳层的 DI 截面很小, 而

且 4d 和 4p 电子被电离之后的洞态能级都高于第二电离阈值, 会进一步发生俄歇衰变且俄歇分支比接近于 1, 其末态为 W^{8+} 离子, 对于 W^{6+} 离子的单电离截面贡献很小, 因此本文忽略了 4d 和 4p 壳层贡献.

W^{6+} 离子的 EA 截面对总的 EISI 截面的贡献包括 5s, 5p 和 4d 壳层. 当激发态能级高于 118.28 eV 时, 可以发生电子碰撞单电离过程, 而当激发态能

级高于 257.94 eV 时, 主要发生双电离甚至多重电离. 对于电子碰撞单电离过程, CE 通道可以表示为



其中, n ($5 \leq n \leq 20$) 和 l ($l \leq 6$) 分别表示主量子数和角量子数. 这些激发通道的能级高于电离阈值时可以进一步通过自发辐射 (RT) 过程或者自电离 (AI) 过程而衰变:

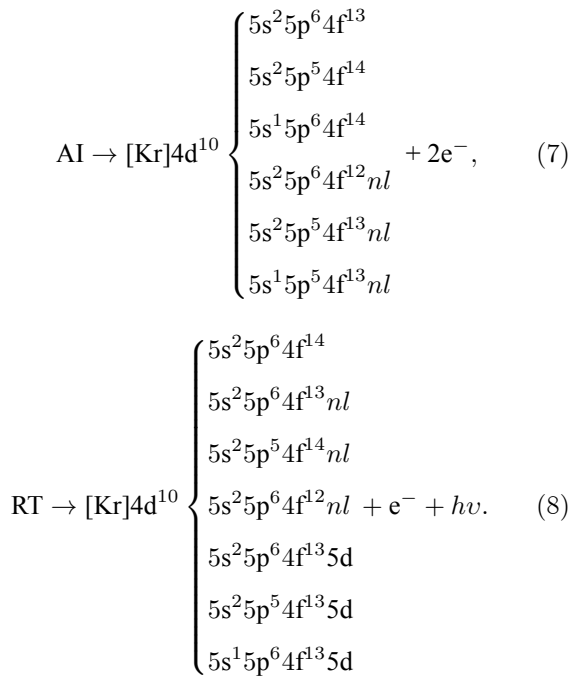


图 1 给出了 W^{6+} , W^{7+} 和 W^{8+} 离子的部分能级和 W^{6+} 离子的单电离和双电离阈值, 图中显示的所有 5s 和 5p (除激发到 20l) 激发到 nl 能级都跨越了 W^{6+} 离子的第一电离阈值, 而 $4d \rightarrow 5d$ 激发态的能级跨越了第二电离阈值, 其中 $5[s,p]^7$ 表示 5s 或 5p 壳层的一个电子激发到 nl 能级. CADW 方法在处理这些能级时会产生不准确的结果, 而 LLDW 方法可以更好地处理这些跨越电离阈值能级的截面. 图 2 为 W^{6+} 离子基态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的 DI 截面, 可以看到 4f 壳层对总 DI 截面的贡献最大, 约占总截面的 62%, 5s 壳层对总 DI 截面的贡献最小. 在入射电子能量小于 250 eV 时, DI 截面随着能量的增大而迅速增大, 入射电子能量大于 250 eV 时, DI 截面随着能量的增大而缓慢减小.

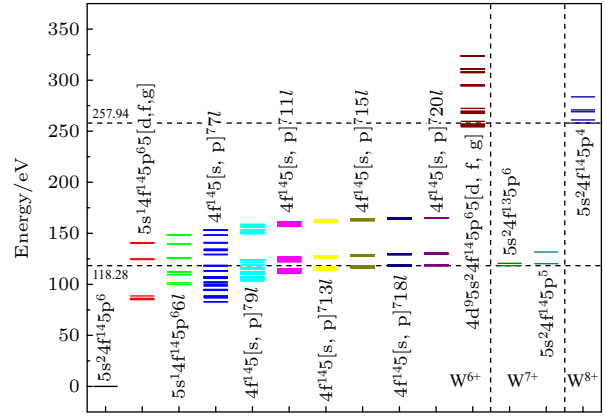


图 1 W^{6+} , W^{7+} 和 W^{8+} 离子主要组态能级, 虚线分别表示 W^{6+} 的单电离和双电离阈值

Fig. 1. Energy levels of the main configurations of W^{6+} , W^{7+} and W^{8+} ions. Dotted horizontal lines mark the thresholds for single and double ionization of W^{6+} .

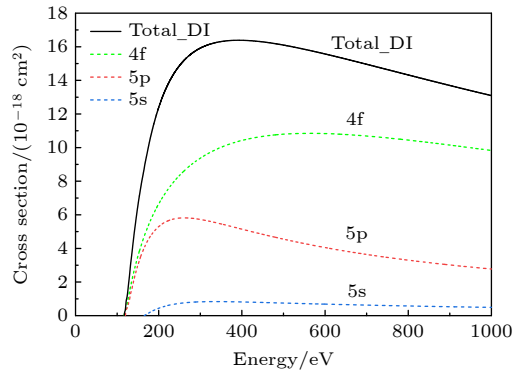


图 2 W^{6+} 离子基态的 DI 截面, 其中蓝色、红色和绿色虚线分别表示 5s, 5p 和 4f 壳层对总 DI 截面的贡献, 黑色实线是总的 DI 截面

Fig. 2. DI cross sections for ground state W^{6+} ions. The blue, red and green dashed lines represent the contribution of the 5s, 5p and 4f subshell to the total DI cross section respectively, the black solid line is the total DI cross section.

由图 1 可知, 对于 5s 壳层, 当激发能从 84.99 eV ($5s \rightarrow 5d$) 到 165.22 eV ($5s \rightarrow 20h$), 有 310 个能级高于第一电离能 118.28 eV, 第 1 个 EA 过程发生在 124.44 eV ($5s \rightarrow 5f$). 对于 5p 壳层, 当激发能从 37.59 eV ($5p \rightarrow 5d$) 到 130.38 eV ($5p \rightarrow 20h$), 有 358 个能级高于第一电离能, 第 1 个 EA 过程发生在 118.39 eV ($5p \rightarrow 7h$). 对于 4d 壳层, $4d \rightarrow 5d$ 的激发能量在 254.22—272.40 eV 之间共有 18 个能级, 其中有 8 个能级处于第一电离能和第二电离能之间, 有 10 个能级高于第二电离能 257.94 eV. 当激发态能级高于第二电离阈值时, 对单电离的贡献几乎为 0, 因此我们忽略了更高 nl 的激发.

为了检验激发到更高 nl 态对 EA 截面的贡献,

图 3 给出了截面峰值处 (160.50 eV) 所计算的 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 激发到不同 nl 能级的截面占总 EA 截面的比值. 从图 3 可以看出, 激发到 $6l$ 的 EA 截面的贡献最大, 约占激发总截面的 21%. 来自 $n \leq 13$ 激发能级对总 EA 截面的贡献达 90%. 随着主量子数 n 的增大, 更高 nl 态对 EA 截面的贡献迅速减小, 当 $n = 20$ 时, 激发能级对总 EA 截面的贡献约为 1.7%. 为了保证计算的准确性, 目前的计算包括了主量子数 n ($5 \leq n \leq 20$) 和角量子数 l ($l \leq 6$).

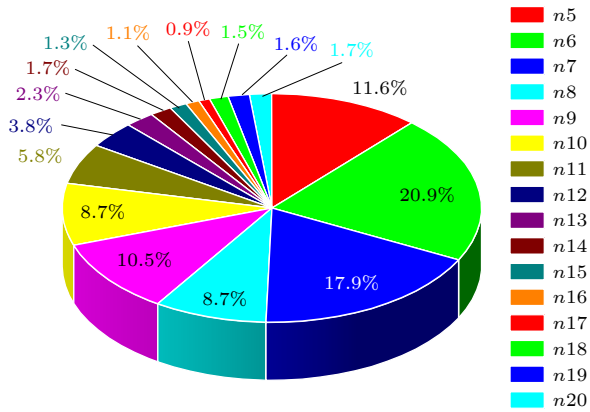


图 3 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 激发到 nl 能级的 EA 截面占总 EA 截面的比例

Fig. 3. Ratios of the EA cross section from the ground state $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ of the W^{6+} to the nl state to the total EA cross section.

图 4 给出了 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 不同壳层 EA 截面随入射电子能量的变化. 从图 4 可以看到, 5s 壳层对总 EA 截面的贡献约为 70%, 4d 壳层对总 EA 截面的贡献最小. 4p 壳层的激发态能级都高于第二电离阈值, 对单电离截的贡献可以忽略.

图 5 给出了 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的 EISI 截面, 图中绿色阴影区域是 W^{6+} 离子基态的 DI 截面, 黄色阴影区域是基态的 EA 截面; 对于基态的 EISI 截面, DI 截面占主导. 将本文结果与 Pindzola 和 Griffin^[16] 使用 CADW 方法计算结果与 Stenke 等^[14] 的实验结果进行比较, 可以看出两种理论计算的基态 EISI 截面基本一致, 但都低于实验结果. 从图 5 可以看出, 低于第一电离阈近 80 eV 的地方, 实验上已经观察到了电离信号, 说明母离子束中有不少离子处于亚稳态. 因此, 要完全重现实验谱, 就必须考虑亚稳态离子对总 EISI 截面的贡献.

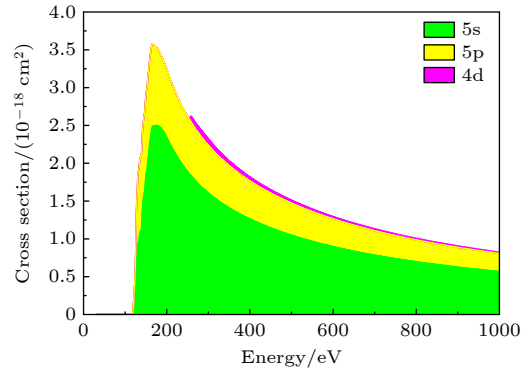


图 4 W^{6+} 离子基态的 EA 截面, 其中绿色、黄色和红色阴影区域分别表示 5s, 5p 和 4d 壳层对总 EA 截面的贡献

Fig. 4. EA cross sections for ground state W^{6+} ions. The green, yellow and red shadow areas represent the contribution of the 5s, 5p and 4d subshell to the total EA cross section, respectively.

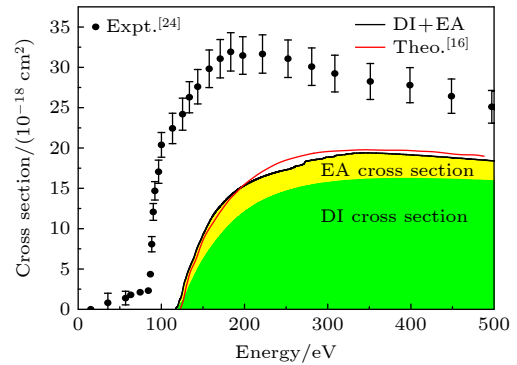


图 5 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的总 EISI 截面, 其中黑色圆点为 Stenke 等^[26] 的实验结果, 黑色实线为目前 LLDW 计算结果, 红色实线为 CADW 结果^[16]

Fig. 5. Total EISI cross section for ground state $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ of W^{6+} ions. Black solid circles are the experimental results of Stenke et al.^[26], black solid line is the present LLDW total cross section, red solid line is CADW calculated result^[16].

3.1.2 亚稳态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1$

亚稳态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1$ 有 20 个能级, 其中寿命大于 10^{-5} s 的能级有 16 个 (对应表 2 中能级标号 1—16), DI 过程表示为

$$e^- + [Kr]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1 \rightarrow \begin{cases} 5s^24f^{13}5p^6 \\ 5s^24f^{13}5p^55d^1 \\ 5s^24f^{12}5p^65d^1 \\ 5s^14f^{13}5p^65d^1 \end{cases} + 2e^- \quad (9)$$

EA 过程包括了来自 4f, 5s 和 5p 壳层的贡献, CE 通道为

$$e^- + [\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1 \rightarrow$$

$$[\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^14f^{13}5p^65[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^14f^{13}5p^65d^1nl \\ 5s^24f^{12}5p^65[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^24f^{12}5p^65d^1nl \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^24f^{13}5p^55d^1nl \end{cases} + e^-, \quad (10)$$

其中 $5[d, f, g]^2; 5d > 0$ 表示 $5d, 5f$ 和 $5g$ 轨道上一共有两个电子 (其中 $5d$ 轨道至少有 1 个电子). 主量子数 $5 \leq n \leq 20$, 角量子数 $l \leq 6$. AI 通道由下式给出:

$$\text{AI} \rightarrow [\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^24f^{13}5p^6 \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^1 \\ 5s^24f^{12}5p^65[d,f,g]^1 \\ 5s^24f^{13}5p^45[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^24f^{12}5p^55[d,f,g]^2; 5d > 0 + 2e^-. \quad (11) \\ 5s^14f^{13}5p^55[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^24f^{13}5p^5nl \\ 5s^24f^{12}5p^6nl \\ 5s^14f^{13}5p^6nl \end{cases}$$

3.1.3 亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$

亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$ 共有 12 个能级, 其中有 9 个长寿命能级 (对应表 2 中能级标号 17—25), 其 DI 通道为

$$e^- + [\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1 \rightarrow$$

$$[\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^24f^{14}5p^5 \\ 5s^24f^{14}5p^45d^1 \\ 5s^24f^{13}5p^55d^1 \\ 5s^14f^{14}5p^55d^1 \end{cases} + 2e^-. \quad (12)$$

EA 过程包括来自 $5s, 5p$ 和 $4f$ 壳层的贡献, CE 通道为

$$e^- + [\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1 \rightarrow$$

$$[\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^14f^{14}5p^55[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^14f^{14}5p^55d^1nl \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^24f^{13}5p^55d^1nl \\ 5s^24f^{14}5p^45[d,f,g]^2; 5d > 0 \\ 5s^24f^{14}5p^45d^1nl \end{cases} + e^-, \quad (13)$$

其中 $5 \leq n \leq 20, l \leq 6$. AI 过程如下:

$$\text{AI} \rightarrow [\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^24f^{14}5p^5 \\ 5s^24f^{14}5p^35d^2 \\ 5s^24f^{13}5p^45d^2 \\ 5s^24f^{14}5p^45[d,f,g]^1 \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^1 + 2e^-. \quad (14) \\ 5s^14f^{14}5p^55[d,f,g]^1 \\ 5s^24f^{14}5p^4nl \\ 5s^24f^{13}5p^5nl \\ 5s^14f^{14}5p^5nl \end{cases}$$

3.1.4 亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1$

亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1$ 有 12 个能级, 其中长寿命能级有 10 个 (对应表 2 能级标号 26—35), DI 通道为

$$e^- + [\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1 \rightarrow$$

$$[\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^24f^{14}5p^5 \\ 5s^24f^{14}5p^45f^1 \\ 5s^24f^{13}5p^55f^1 \\ 5s^14f^{14}5p^55f^1 \end{cases} + 2e^-. \quad (15)$$

EA 包括 $5s, 5p$ 和 $4f$ 壳层的激发, 其中 $5 \leq n \leq 20, l \leq 6$. EA 通道如下:

$$e^- + [\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1 \rightarrow$$

$$[\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^14f^{14}5p^55[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^14f^{14}5p^55f^1nl \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{13}5p^55f^1nl \\ 5s^24f^{14}5p^45[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{14}5p^45f^1nl \end{cases} + e^-, \quad (16)$$

$$\text{AI} \rightarrow [\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^24f^{14}5p^5 \\ 5s^24f^{14}5p^45[d,f,g]^1 \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^1 \\ 5s^14f^{14}5p^55d^1 \\ 5s^24f^{12}5p^55[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{13}5p^45[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{14}5p^35[d,f,g]^2; 5f > 0 + 2e^-. \quad (17) \\ 5s^24f^{14}5p^4nl \\ 5s^24f^{13}5p^5nl \\ 5s^24f^{14}5p^35f^1nl \\ 5s^24f^{13}5p^45f^1nl \\ 5s^24f^{12}5p^55f^1nl \\ 5s^24f^{13}5p^45f^1nl \end{cases}$$

3.1.5 亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^l$

亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^l$ 共有 26 个能级, 其中有 24 个长寿命能级 (对应表 2 能级标号 36—59), 其 DI 通道为

$$e^- + [\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^l \rightarrow \begin{cases} 5s^24f^{13}5p^6 \\ 5s^24f^{13}5p^55f^l \\ 5s^24f^{12}5p^65f^l \\ 5s^14f^{13}5p^65f^l \end{cases} + 2e^-. \quad (18)$$

EA 包括 5s, 5p 和 4f 壳层的激发, 其中 $5 \leq n \leq 20, l \leq 6$. EA 通道为

$$e^- + [\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^l \rightarrow \begin{cases} 5s^14f^{13}5p^65[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^14f^{13}5p^65f^l nl \\ 5s^24f^{12}5p^65[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{12}5p^65f^l nl \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{13}5p^55f^l nl \end{cases} + e^-, \quad (19)$$

$$\text{AI} \rightarrow [\text{Kr}]4d^{10} \begin{cases} 5s^24f^{13}5p^6 \\ 5s^24f^{13}5p^55[d,f,g]^1 \\ 5s^24f^{12}5p^65[d,f,g]^1 \\ 5s^14f^{13}5p^65[d,f]^1 \\ 5s^24f^{13}5p^45[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{12}5p^55[d,f,g]^2; 5f > 0 \\ 5s^24f^{11}5p^65f^2 \\ 5s^24f^{13}5p^5 nl \\ 5s^24f^{12}5p^6 nl \\ 5s^24f^{11}5p^65f^1 nl \end{cases} + 2e^-. \quad (20)$$

图 6 为亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1$, $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$, $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1$ 和 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^1$ 的 EISI 截面. 图中显示在截面峰值处亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1$ 和 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^1$ 的长寿命能级截面约为 50 Mb, 电离阈值在 30 eV 左右, 这与实验截面起始值 (~ 30 eV) 基本一致. 而亚稳态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1$ 和 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$ 能级的截面约为 26 Mb, 电离阈值约为 80 eV, 与 Stenke 等^[14] 在低于基态 $[\text{Kr}]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 电离阈值处观察到的电离信号基本符合.

3.2 总截面

为了将计算结果与 Stenke 等^[14] 的实验结果进行比较, 需要知道母离子束中对单电离截面有贡献的每个长寿命能级所占的比值 λ_i . 由于这些比值无法在实验中确定, 我们在计算截面的基础上, 使用了 3 种不同的模型拟合实验谱从而来预测 λ_i . 这些模型的可行性已经在 W^{5+} , W^{7+} , W^{8+} , W^{9+} 和 W^{10+} 的 EISI 计算中得到了验证^[21-23,30].

在第 1 个模型 (Model 1) 中, 总截面如下所示:

$$\sigma^{\text{exp}}(E_e) = \sum_k c_k \frac{\sum_i (2 \times {}^k J_i + 1) {}^k \sigma_i^{\text{th}}(E_e)}{\sum_i (2 \times {}^k J_i + 1)}, \quad (21)$$

其中 $\sigma^{\text{exp}}(E_e)$ 是实验上获取的总电离截面, c_k 是所考虑的 5 个组态的拟合系数, ${}^k J_i$ 是组态 k 中能级 i 的总角动量子数, ${}^k \sigma_i^{\text{th}}(E_e)$ 是计算的组态 k 中长寿命能级 i 的总 EISI 截面. 利用 (21) 式对实验谱拟合, 就获得了每个组态的拟合系数 (见表 3).

表 3 模型 1 和模型 2 中不同亚稳态 W^{6+} 离子的比值
Table 3. Fractions of the various metastable W^{6+} ions in Model 1 and Model 2.

Configurations	Energy range (Model 1)/eV		Energy range (Model 2)/eV	
	[0, 118]	[118, 1000]	[0, 118]	[118, 1000]
5p ⁶	0	0.35	0	0.31
4f ¹³ 5d ¹	0.40	0.10	0.35	0.10
5p ⁵ 5d ¹	0.40	0.11	0.35	0.12
5p ⁵ 5f ¹	0.10	0.22	0.15	0.23
4f ¹³ 5f ¹	0.10	0.22	0.15	0.24

在第 2 个模型 (Model 2) 中, 假设能级布居符合玻尔兹曼分布, 将 (21) 式修改为

$$\sigma^{\text{exp}}(E_e) = \sum_k c_k \frac{\sum_i (2 \times {}^k J_i + 1) \exp[-E_i/(kT)] {}^k \sigma_i^{\text{th}}(E_e)}{\sum_i (2 \times {}^k J_i + 1) \exp[-E_i/(kT)]}, \quad (22)$$

其中 E_i 为能级 i 的激发能; k 是玻尔兹曼常数; T 为 W^{6+} 离子丰度峰值处的温度, 其大小为 274000 K^[5].

在第 3 个模型 (Model 3) 中, 将每个长寿命级都考虑在内, 并给出了每个能级的拟合系数 (见表 4):

$$\sigma^{\text{exp}}(E_e) = \sum_{i=1}^r \lambda_i \sigma_i^{\text{th}}(E_e), \quad (23)$$

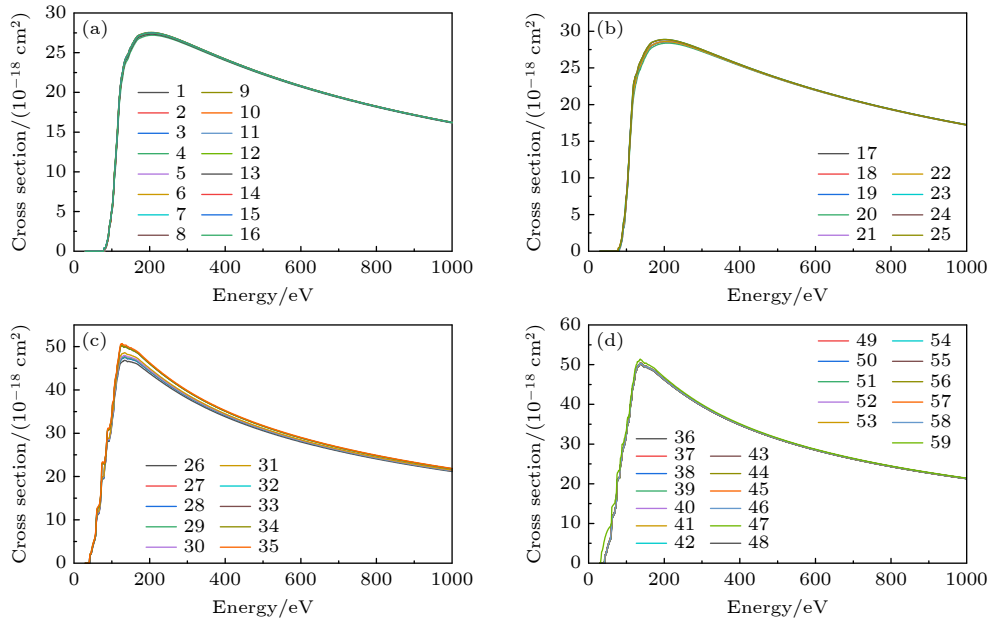


图 6 亚稳态 $4d^{10}5s^2 4f^{13}5p^6 5d^1$ (a), $[Kr]4d^{10}5s^2 4f^{14}5p^5 5d^1$ (b), $4d^{10}5s^2 4f^{14}5p^5 5f^1$ (c) 和 $4d^{10}5s^2 4f^{13}5p^6 5f^1$ (d) 长寿命能级的 EISI 截面
 Fig. 6. EISI cross sections for the metastable levels in the configuration $4d^{10}5s^2 4f^{13}5p^6 5d^1$ (a), $[Kr]4d^{10}5s^2 4f^{14}5p^5 5d^1$ (b), $4d^{10}5s^2 4f^{14}5p^5 5f^1$ (c) 和 $4d^{10}5s^2 4f^{13}5p^6 5f^1$ (d).

表 4 模型 3 中 W^{6+} 离子 60 个长寿命能级的比值 λ_i
 Table 4. Fractions λ_i of 60 long-lived levels for for W^{6+} ions the Model 3.

Level index	Energy range/eV		Level index	Energy range/eV	
	[0, 118]	[118, 1000]		[0, 118]	[118, 1000]
0	0	0.31000	30	0.00800	0.02300
1	0.04468	0.00625	31	0.00800	0.02300
2	0.04468	0.00625	32	0.00800	0.02300
3	0.04468	0.00625	33	0.00800	0.02300
4	0.04468	0.00625	34	0.00800	0.02300
5	0.04469	0.00625	35	0.00800	0.02300
6	0.04469	0.00625	36	0.00333	0.01000
7	0.04469	0.00625	37	0.00333	0.01000
8	0.04469	0.00625	38	0.00333	0.01000
9	0.04469	0.00625	39	0.00333	0.01000
10	0.04469	0.00625	40	0.00333	0.01000
11	0.04469	0.00625	41	0.00333	0.01000
12	0.04469	0.00625	42	0.00333	0.01000
13	0.04469	0.00625	43	0.00333	0.01000
14	0.04469	0.00625	44	0.00333	0.01000
15	0.04469	0.00625	45	0.00333	0.01000
16	0.04469	0.00625	46	0.00333	0.01000
17	0.13880	0.01333	47	0.00333	0.01000
18	0.13890	0.01333	48	0.00333	0.01000
19	0.13890	0.01333	49	0.00333	0.01000
20	0.13890	0.01333	50	0.00333	0.01000
21	0.13890	0.01333	51	0.00333	0.01000
22	0.13890	0.01333	52	0.00334	0.01000
23	0.13890	0.01334	53	0.00334	0.01000
24	0.13890	0.01334	54	0.00334	0.01000
25	0.13890	0.01334	55	0.00334	0.01000
26	0.00800	0.02300	56	0.00334	0.01000
27	0.00800	0.02300	57	0.00334	0.01000
28	0.00800	0.02300	58	0.00334	0.01000
29	0.00800	0.02300	59	0.00334	0.01000

其中 r 是所有长寿命能级的个数; λ_i 是拟合系数, 表示处于长寿命能级 i 的离子占母离子束的比值, 并且已被归一化 (即 $\sum_{i=1}^r \lambda_i = 1$).

3 种理论模型加权平均的方式不同, 所评估的拟合系数不同. 模型 1 假设每个有贡献的组态内能级满足能级统计布居, 并为每个有贡献的组态分配了统计权重, 从而拟合实验截面. 模型 2 假定 W^{6+} 离子的激发态能级满足玻尔兹曼分布. 模型 3 主要基于数学方法给出所有可能能级的拟合系数, 没有太多的物理依据.

根据计算的 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的电离阈值是 118.28 eV, 推测当入射电子能量 $E < 118.28$ eV 时, 对总 EISI 截面的贡献均来自亚稳态, 即基态占比为 0. 当 $E > 118.28$ eV 时, W^{6+} 离子基态占主导, 结合 (21)–(23) 式得到的拟合系数分别列于表 3 和表 4.

在获得了各亚稳态离子在母离子束中的比值之后, 将 W^{6+} 离子的总 EISI 截面和 Stenke 等 [14] 的实验结果进行比较, 见图 7. 从图 7 可以看出, 只考虑基态的 EISI 截面要远小于实验结果, 最大差异为 50%; 而考虑了亚稳态的贡献之后, 利用 3 种模型拟合的结果和实验结果吻合都很好. 在 3 种模型中, 计算的 20–80 eV 能量范围内的截面, 很好地解释了实验中观察到低于基态电离阈值的电离信号. 在截面最大值附近, 模型 2 和模型 3 略高于实验值, 模型 1 与实验结果更接近.

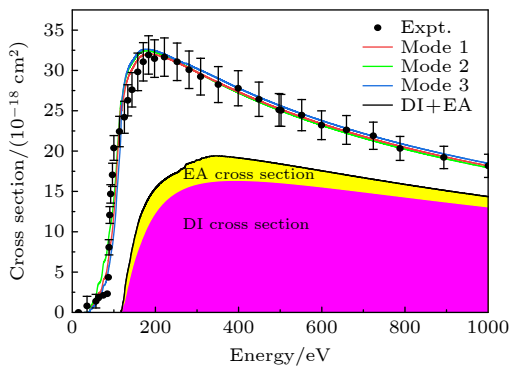


图 7 W^{6+} 离子的拟合截面与实验 [14] 的比较, 其中红色、绿色和蓝色虚线分别表示模型 1、模型 2 和模型 3 的结果; 黑色实线为基态 $4f^{14}5p^6$ 的 EISI 截面

Fig. 7. Comparison of our W^{6+} ions fitting EISI with experiment [14]. Red, green and blue solid line represent the results of the Model 1, Model 2 and Model 3, respectively. The black solid line is the EISI cross section of ground state $4f^{14}5p^6$.

3.3 拟合系数

为了便于等离子体建模, 使用以下公式 [31] 拟合了 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的 EISI 截面:

$$\sigma_{total}^{EI_0}(\varepsilon) = \frac{10^{-13}}{\varepsilon} \left[A_0 \ln \frac{\varepsilon}{I_0} + \sum_{i=1}^7 A_i \left(1 - \frac{I_0}{\varepsilon} \right)^i \right], \quad (24)$$

其中, ε (eV) 是入射电子能量, I_0 (eV) 为电离势, A_i 为拟合系数, 获得的拟合系数展示于图 8 中.

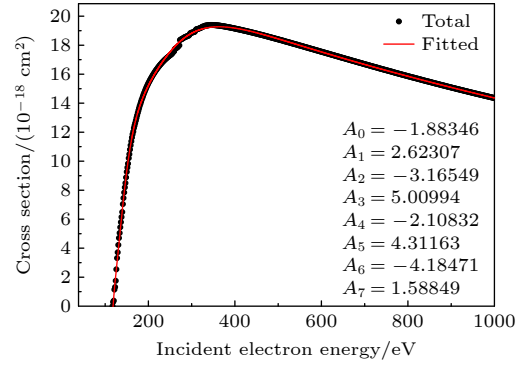


图 8 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 的 EISI 截面, 其中黑色圆点为 LLDW 方法计算的结果, 红色实线为 (24) 式拟合的结果

Fig. 8. Electron-impact ionization cross sections for W^{6+} ions ground state $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$. Black dots are the results for calculated using the LLDW method, red dashed line is the results for the fitting results by Eq. (24).

4 总结

本文利用 LLDW 方法计算了 W^{6+} 离子基态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^6$ 和亚稳态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55d^1$, $[Kr]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65d^1$ $[Kr]4d^{10}5s^24f^{14}5p^55f^1$ $[Kr]4d^{10}5s^24f^{13}5p^65f^1$ 的 EISI 截面, 主要包括了 DI 和 EA 的贡献. 与 Stenke 等 [14] 的实验结果进行比较, 发现只考虑基态的 EISI 截面比实验测量结果约低 50%; 我们用 3 种模型预测了母离子束中处于不同长寿命亚稳态能级的 W^{6+} 离子的比值, 考虑了亚稳态离子对 EISI 截面的贡献之后, 3 种模型的拟合结果很好地重现了 Stenke 等 [14] 的实验谱.

参考文献

- [1] Demura A V, Kadomtsev M B, Lisitsa V S, Shurygin V A 2015 *High Energy Density Physics* 15 49
- [2] Biedermann C, Radtke R, Seidel R, Pütterich T 2009 *Phys. Scr.* **T134** 014026

- [3] Colgan J, Pindzola M S 2012 *Eur. Phys. J. D* **66** 284
- [4] Wirth B D, Nordlund K, Whyte D G, Xu D 2011 *MRS Bull.* **36** 216
- [5] Preval S P, Badnell N R, O'Mullane M G 2019 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **52** 025201
- [6] Kramida A E, Reader J 2006 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **92** 457
- [7] Pütterich T, Neu R, Dux R, Whiteford A D, O'Mullane M G, Summers H P 2010 *Nucl. Fusion* **50** 025012
- [8] Müller A 2015 *Atoms* **3** 120
- [9] Pütterich T, Fable E, Dux R, O'Mullane M, Neu R, Siccino M 2019 *Nucl. Fusion* **59** 056013
- [10] Montague R G, Harrison M F A 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 2707
- [11] Rausch J, Becker A, Spruck K, Hellhund J, Borovik A, Huber K, Schippers S, Müller A 2011 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44** 165202
- [12] Borovik A, Ebinger B, Schury D, Schippers S, Müller A 2016 *Phys. Rev. A* **93** 012708
- [13] Schury D, Borovik A, Ebinger B, Jin F, Spruck K, Müller A, Schippers S 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 015201
- [14] Stenke M, Aichele K, Harthiramani D, Hofmann G, Steidl M, Volpel R, Salzborn E 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 2711
- [15] Ballance C P, Loch S D, Pindzola M S, Griffin D C 2013 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **46** 055202
- [16] Pindzola M S, Griffin D C 1997 *Phys. Rev. A* **56** 1654
- [17] Zhang D, Xie L, Jiang J, Wu Z, Dong C, Shi Y, Qu Y 2018 *Chin. Phys. B* **27** 053402
- [18] Zhang D H, Kwon D H 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 075202
- [19] Jin F, Borovik A, Ebinger B, Schippers S 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 075201
- [20] Jin F, Borovik A, Ebinger B, Schippers S 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 175201
- [21] Jonauskas V, Kynienė A, Kučas S, Pakalka S, Masys Š, Prancikevičius A, Borovik A, Gharaibeh M F, Schippers S, Müller A 2019 *Phys. Rev. A* **100** 062701
- [22] Chen L, Li B, Chen X 2022 *J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans.* **285** 108179
- [23] Bao R, Wei J, Chen L, Li B, Chen X 2023 *Chin. Phys. B* **32** 063401
- [24] Yan C L, Lu Q, Xie Y M, Li B L, Fu N, Zou Y, Chen C, Xiao J 2022 *Phys. Rev. A* **105** 032820
- [25] Gu M F 2008 *Can. J. Phys.* **86** 675
- [26] Stenke M, Aichele K, Hathiramani D, Hofmann G, Steidl M, Volpel R, Shevelko V P, Tawara H, Salzborn E 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 4853
- [27] Jonauskas V, Kučas S, Karazija R 2009 *Lithuanian J. Phys.* **49** 415
- [28] Grant I P, McKenzie B J 1980 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13** 2671
- [29] Kramida A, Ralchenko Yu, Reader J, NIAT ASD Team 2021 NISI Atomic Spectra Database
- [30] Zhang S, Zhang F, Zhang D, Ding X, Jiang J, Xie L, Ma Y, Li M, Sikorski M, Dong C 2024 *Chin. Phys. B* **33** 033401
- [31] Dipti, Das T, Bartschat K, Bray I, Fursa D V, Zatsarinny O, Ballance C, Chung H K, Ralchenko Yu 2019 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **127–128** 1

Theoretical investigation of electron-impact ionization of W^{6+} ion*

Ma Li-Li Zhang Shi-Ping Zhang Fang-Jun Li Mai-Juan Jiang Jun
Ding Xiao-Bin Xie Lu-You Zhang Deng-Hong[†] Dong Chen-Zhong

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

(Received 21 March 2024; revised manuscript received 24 April 2024)

Abstract

Due to its unique characteristics, metal tungsten has been selected as the wall material for the tokamak magnetic confinement fusion device. The wall material directly interacts with the plasma for a long time, thus causing tungsten atoms and ions to be sputtered and ionized into different charge states, which then enter the tokamak device as plasma impurities. To ensure stable plasma combustion conditions, highly complex model is currently being used to evaluate the behavior of tungsten impurities and their influence on the tokamak plasma. This requires various high-precision atomic data for tungsten atoms and different ionized states of tungsten ions. Electron collision ionization, as a fundamental atomic physical process, is widely encountered in laboratory and astrophysical plasma environments. The parameters such as electron collision ionization cross-sections and rate coefficients are crucial for plasma radiation transport simulations and state diagnostics.

Electron-impact single-ionization (EISI) cross sections of the ground state and metastable state for W^{6+} ions are calculated by using the level-to-level distorted-wave (LLDW) method. The contributions of direct ionization (DI) cross section and excited autoionization (EA) cross section to the total EISI cross section are primarily considered.

Comparison of our calculation results with the experimental data from Stenke et al. (Stenke M, Aichele K, Harthiramani D, Hofmann G, Steidl M, Volpel R, Salzborn E 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 2711) reveals that the EISI cross section considering only the ground state is significantly smaller than the experimental result. Therefore, it is imperative to take into account the contribution from the metastable state. To determine the fraction of ions in long-lived energy levels within the parent ion beam, three models are employed.

Our results, which include the contribution of metastable states, accord well with the experimental results of Stenke et al. Compared with the theoretical calculation result of Pindzola et al. our calculation provides a more comprehensive understanding of the electron-impact single-ionization process for W^{6+} ions. The comparison is illustrated in the attached figure.

Keywords: tungsten ions, electron-impact, metastable states, direct ionization, excited autoionization

PACS: 34.80.Dp, 34.50.Fa

DOI: [10.7498/aps.73.20240408](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240408)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12364034) and the Science and Technology Project of Gansu Province, China (Grant No. 23YFFA0074).

[†] Corresponding author. E-mail: zhangdh@nwnu.edu.cn

W^{6+} 离子的电子碰撞电离研究

马莉莉 张世平 张芳军 李麦娟 蒋军 丁晓彬 颀录有 张登红 董晨钟

Theoretical investigation of electron-impact ionization of W^{6+} ion

Ma Li-Li Zhang Shi-Ping Zhang Fang-Jun Li Mai-Juan Jiang Jun Ding Xiao-Bin Xie Lu-You
Zhang Deng-Hong Dong Chen-Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 123401 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240408

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240408>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

中高 Z 元素原子、离子的电子碰撞电离与激发截面快速计算方法

Fast computation approach of electron-impact ionization and excitation cross-sections for atoms and ions with medium- and high- Z elements

物理学报. 2024, 73(10): 103104 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240213>

镱原子自电离态的共振电离谱

Resonance ionization spectrum of autoionization states of lutetium atom

物理学报. 2023, 72(19): 193203 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230978>

利用质子能损诊断部分电离等离子体靶中的束缚电子密度

Diagnosis of bound electron density by measuring energy loss of proton beam in partially ionized plasma target

物理学报. 2024, 73(7): 073401 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231736>

Ar原子和 K^+ 离子序列双光双电离光电子角分布的非偶极效应

Non-dipole effects on angular distribution of photoelectrons in sequential two-photon double ionization of Ar atom and K^+ ion

物理学报. 2022, 71(6): 063201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211905>

数百MeV/u高能区 C^{6+} 离子激发W的L壳层 X射线

W L-shell X-ray emission induced by C^{6+} ions with several hundred MeV/u

物理学报. 2022, 71(11): 113201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20212322>

采用薄靶方法测量低能电子致Al, Ti, Cu, Ag, Au元素K壳层电离截面与L壳层特征X射线产生截面

Measurements of K-shell ionization cross sections and L-shell X-ray production cross sections of Al, Ti, Cu, Ag, and Au thin films by low-energy electron impact

物理学报. 2022, 71(17): 173402 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220162>