

W¹³⁺离子的电子碰撞单电离截面的理论研究*

张世平¹⁾²⁾ 张芳军¹⁾⁴⁾ 李麦娟¹⁾ 张登红^{1)3)†}

1) (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)

2) (武威第八中学, 武威 733000)

3) (天水师范大学物理系, 天水 741001)

4) (兰州工业学院计算机与人工智能学院, 兰州 730070)

(2025 年 9 月 17 日收到; 2025 年 10 月 22 日收到修改稿)

采用细致能级扭曲波 (level-to-level distorted-wave, LLDW) 方法详细地计算了 W¹³⁺离子基组态 [Kr] 4d¹⁰5s²4f¹³ 和亚稳态 [Kr]4d¹⁰5s²4f¹²5p 的电子碰撞单电离 (EISI) 截面, 主要包括了直接电离 (DI) 和激发自电离 (EA) 截面对 EISI 截面的贡献. 为提升计算可靠性, 我们在原子结构计算中引入了组态相互作用. 本文还重点计算了长寿命亚稳态对 EISI 截面的贡献, 其中母离子束中长寿命亚稳态所占的分数是通过理论模型来确定的. 将本文的计算结果与 Schury 等的实验结果和理论结果 (2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 015201) 进行比较, 发现在考虑了长寿命亚稳态的贡献后本文计算结果和 Schury 等的实验结果吻合得很好.

关键词: 钨离子, 电子碰撞单电离, 亚稳态, 直接电离, 激发自电离**DOI:** 10.7498/aps.75.20251275**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251275

1 引言

电子与原子或离子碰撞是自然界中一种基本的微观物理过程, 其结果多样, 主要包括电子碰撞激发 (EIE)、电子碰撞电离 (EII) 以及双电子复合 (DR) 等过程^[1]. 电子碰撞电离作为等离子体环境中的主要原子过程之一, 普遍存在于实验室和天体物理等离子体环境中^[2]. 在碰撞电离平衡条件下, 电子碰撞电离过程和电子复合过程的动态平衡决定了等离子体的电荷态分布. 准确的电荷态分布对于推断等离子体的电子温度、电子密度和元素丰度等非常重要. 在等离子体建模中, 精确的原子数据, 如能级、跃迁概率、电子碰撞激发截面和电子碰撞电离截面等具有至关重要的作用. 电子碰撞单电离 (EISI) 过程进一步细分为直接电离 (DI) 和间接电离过程, 后者包括激发自电离 (EA)、共振激发

双自电离 (REDA) 以及共振激发双电子自电离 (READI) 等^[3-5]. 值得注意的是, 共振激发仅在入射电子能量满足特定条件时发生.

钨 (W) 作为一种重要的过渡金属, 具有独特的物理和化学特性. 它以其极高的熔点而著称, 是所有金属中熔点最高的, 这一特性赋予了钨在高温环境下卓越的稳定性和耐热性. 此外, 钨还具有高密度、高强度和优良的电导性, 这些特性使其在工业领域占有重要地位. 钨的高熔点、高硬度使其成为高温应用的理想材料, 广泛应用于航空航天、核工业以及火箭喷嘴、宇航器部件等需要耐受极端高温的环境. 在托卡马克磁约束核聚变装置中, 钨因其高熔点、高热导率和低溅射率等特性, 被用作内壁材料^[6-8]. 因此, 对钨离子的精确原子数据进行实验测量和理论计算已成为当前研究的热点. 作为 74 号元素, 钨属于重金属, 具有极为复杂的原子结构, 这使得对钨在各种离化态下的原子数据的理论

* 国家自然科学基金 (批准号: 12364034, 12464036) 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

计算充满了挑战.

在过去几十年中, 众多研究者对离子的电子碰撞单电离过程进行了广泛的实验测量和理论计算. 在实验方面, 重离子储存环法和电子-离子交叉测量法等技术被广泛应用. 特别是电子-离子交叉测量法, 因其广泛的适用性和较高的测量精度, 成为测量电子与离子碰撞单电离和多重电离截面的首选方法.

Montague 等^[9]利用电子-离子交叉束装置对 W^+ 和 W^{2+} 的电子碰撞单电离截面进行了测量. Stenke 等^[10,11]用相同装置对 W^{q+} ($q = 1-10$) 离子的电子碰撞单电离截面、双电离截面以及三电离截面进行了测量. Rausch 等^[12]则测量了 W^{17+} 离子从阈值到 1000 eV 的单和双电离截面. Spruck 等^[13]在测量 W^{q+} ($q \leq 17$) 离子的绝对截面时, 注意到在多电子离子电离实验测量中存在大量长寿命激发态. Borovik 等^[14]测量了 W^{19+} 离子的电子碰撞单电离截面并采用组态平均扭曲波 (CADW) 方法进行了理论计算. 近年来, Schury 等^[15]利用 Giessen 电子-离子交叉束装置测量了 W^{q+} ($11 \leq q \leq 18$) 离子从阈值到 1000 eV 的电子碰撞单电离截面.

在理论计算方面, 由于 W^{q+} 离子具有开放的 d 或 f 壳层, 这为理论计算带来了显著的挑战. 目前, 常用的理论方法包括 R 矩阵法^[16-19], TDCC (time-dependent close coupling)^[20-23], CADW 方法^[24-26]以及细致能级扭曲波 (LLDW) 等方法^[27-31]. 在这些方法中, CADW 方法和 LLDW 方法因其广泛的适用性和较高的计算精度而被广泛使用. Pindzola 等通过 CADW 方法计算了 W^{4+} — W^{6+} ^[32]以及 W^{27+} ^[33] 离子的电子碰撞单电离截面. Loch 等^[24]分别使用 CADW 方法计算了钨所有电荷态离子的电子碰撞电离截面. Jin 等^[4,34]利用 SCADW 和 LLDW 混合的方法计算了 W^{q+} ($q = 14-16$) 的电子碰撞单电离截面. 我们研究组^[5,27,35]使用 LLDW 方法计算了 W^{4+} , W^{5+} , W^{8+} 和 W^{17+} 离子的 EISI. Bao 等使用 LLDW 方法计算了 W^{q+} ($q = 7$ ^[36], 9^[28], 10^[28]) 离子的 EISI 截面, 特别关注了亚稳态对电子碰撞单电离截面的贡献. 最近, Jonauskas 等^[37]计算了 W^{5+} 离子的亚稳态对 EISI 的贡献, 并用理论模型估算了亚稳态在母离子束中所占的分数.

最近 Schury 等^[15]使用电子-离子交叉束装置测量了 W^{q+} 离子的 EISI 截面, 并在低于基态 [Kr]

$4d^{10}5s^24f^{13}$ 电离阈值处观察到了电离信号, 测得的 EISI 截面的能量范围起始于低于相应的电离阈值到 1000 eV, 这表明实验中存在长寿命亚稳态的贡献. 他们还利用 SCADW 方法计算了基态 [Kr] $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的 EISI 截面, 为了与实验测量的 EISI 截面匹配, 他们对计算的 EISI 截面乘了一个比例因子, 结果发现乘了比例因子之后在 1000 eV 处他们的理论和实验结果吻合得较好, 但是在电离阈值附近他们的理论和实验存在差异. 这是由于 SCADW 无法计算所有贡献能级各自对应的电离阈值, 而这些激发态能级具有较低的电离阈值, 从而导致截面在阈值附近被低估以及没有考虑亚稳态对总 EISI 截面的影响. 本文利用 LLDW 方法详细地计算了 W^{13+} 离子基组态 [Kr] $4d^{10}5s^24f^{13}$ 和亚稳态 [Kr] $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的能级、辐射跃迁概率、自电离概率、分支比、电子碰撞激发截面以及 EISI 截面. 并通过 Jonauskas 等^[37]提出的理论模型来预估亚稳态所占的分数, 确定 W^{13+} 离子亚稳态对总 EISI 截面的贡献, 从而解决理论和实验在阈值附近存在差异的问题.

2 理论方法

本文利用基于 FAC 程序包^[38]的 LLDW 方法详细计算了 W^{13+} 离子的基态和亚稳态的能级、辐射跃迁概率、俄歇跃迁概率、直接电离 (DI) 截面以及激发自电离 (EA) 截面, 其中 DI 截面可以由下式表示:

$$\sigma_{ij}^{DI}(\varepsilon) = \frac{1}{k_i^2 g_i} \Omega_{ij}, \quad (1)$$

其中 ε 为入射电子的能量, k_i 是入射电子能量, g_i 是初态的统计权重, Ω_{ij} 为碰撞强度.

EA 可以看作是一个间接的两步过程, 第一步是电子碰撞激发, 第二步是这些激发态可能高于电离阈值, 则会发生自电离. 其碰撞激发截面为

$$\sigma_{ik}^{CE}(\varepsilon) = \frac{\pi}{k_i^2 g_i} \Omega_{ik}, \quad (2)$$

其中 Ω_{ik} 为碰撞激发的强度.

对于 W^{13+} 离子的 EISI 截面主要包含 DI 和 EA 过程, 具体表达式为^[39,40]

$$\sigma_{ij}(\varepsilon) = \sigma_{ij}^{DI}(\varepsilon) + \sum_k \sigma_{ik}^{CE}(\varepsilon) B_{kj}^a, \quad (3)$$

其中 $\sigma_{ij}^{DI}(\varepsilon)$ 为直接电离截面; $\sigma_{ik}^{CE}(\varepsilon)$ 是电子碰撞激发截面; B_{kj}^a 为从能级 k 到能级 j 的自电离分支比, 其表达式为^[41]

$$B_{kj}^a = \frac{A_{kj}^a}{\sum_m A_{km}^r + \sum_n A_{kn}^a}, \quad (4)$$

其中 A_{km}^r 代表 A^{q+} 离子从初态 k 到末态 m 的辐射跃迁概率; A_{kn}^a 表示处于能级 k 的 A^{q+} 离子到处于能级 n 的 $A^{(q+1)+}$ 离子的自电离概率。

由于在实验中存在长寿命亚稳态能级, 所以需要计算基组态和长寿命亚稳态的 EISI 截面, 并考虑每个能级在总 EISI 截面中所占的分数, 可以通过下面的式子得到:

$$\sigma^{\text{exp}}(E_c) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \sigma_i^{\text{th}}(E_c), \quad (5)$$

其中 λ_i 表示每个能级 i 占总截面的分数, m 是我们所考虑的所有能级数^[37]。

3 结果与讨论

3.1 W^{13+} 离子的能级

图 1 给出了 W^{13+} , W^{14+} 和 W^{15+} 离子的基态以及部分激发态的能级, 分别用绿色、蓝色和粉色表示。图 1(a)—(d) 分别表示来自 5s, 4d, 4p 和 4s 壳

层的单激发态的能级, 这里给出了主量子数 $n = 12$, 角量子数 $l' \leq 6$ 的所有激发态的能级。图中还给出了 W^{13+} 离子的电离能, 本文计算的单电离能和双电离能分别为 289.09 eV 和 614.63 eV。可以看到, $5s \rightarrow 12l'$ 激发态的能级基本都低于单电离能, $4d \rightarrow nl'$ ($n = 6-12$) 这些激发态的能级都高于单电离能但是低于双电离能。 $4p \rightarrow nl'$ ($n = 5-7$) 这些激发态的部分能级在单电离能和双电离能之间。 $4s \rightarrow nl'$ ($n = 5-6$) 这些激发态的能级基本都高于双电离能。将本文使用 LLDW 方法计算的单电离能与 NIST^[42] 推荐值 ((290.7±1.2) eV) 以及 Schury 等^[15] 使用 SCADW 方法计算 ((289.0±3) eV) 的结果进行比较, 发现本文计算结果与 NIST 和 Schury 等的结果吻合得很好。在计算 EISI 截面时, 本文考虑了所有处于单电离能和双电离能之间所有能级的 EISI 截面。

3.1.1 基态基组态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{13}$

在获得精确的波函数之后, 首先计算了 W^{13+} 离子基态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的 DI 截面, 主要考虑了来自 4f, 5s 和 4d 壳层对 DI 截面的贡献, 具体的 DI 通道可以表示为

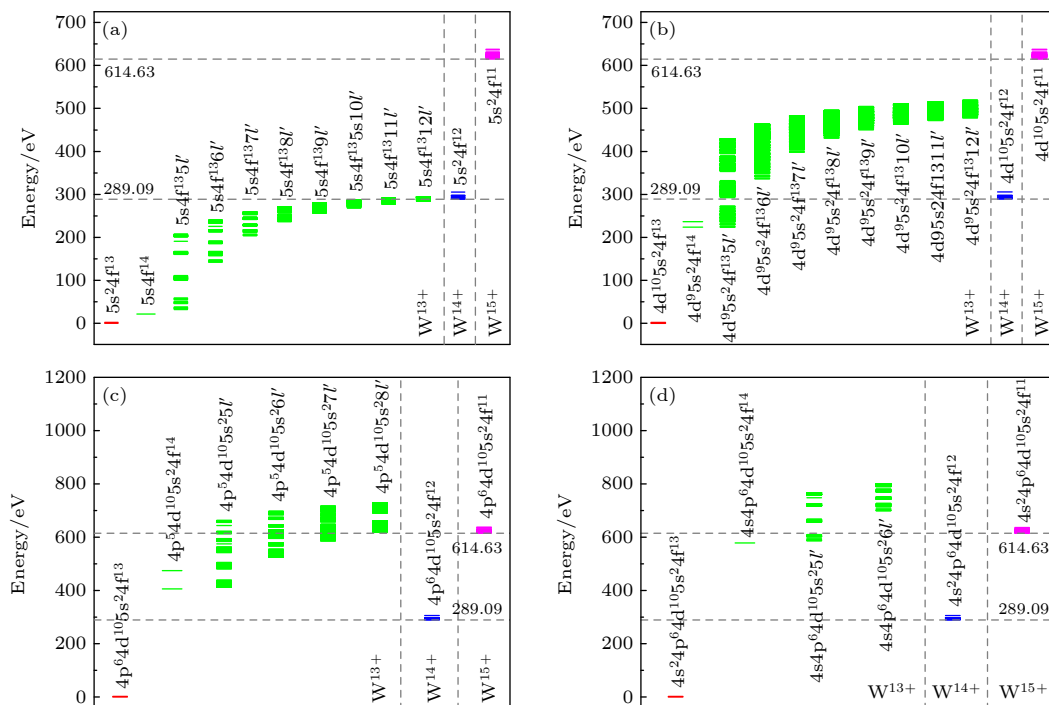
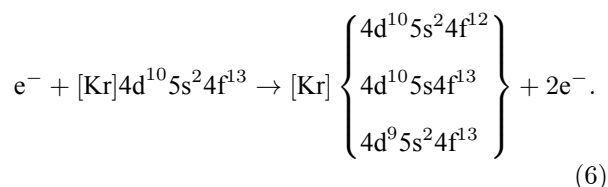


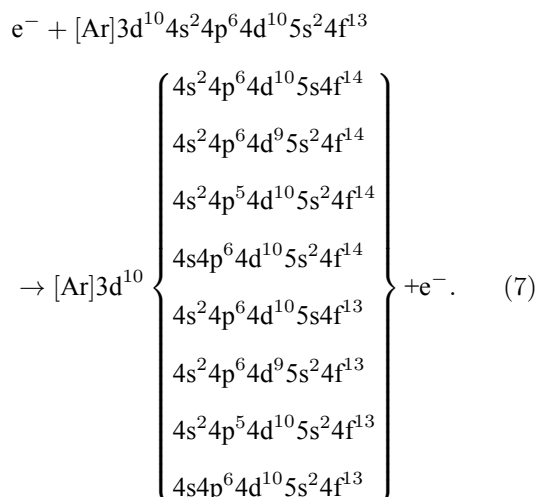
图 1 W^{13+} , W^{14+} 和 W^{15+} 离子的基组态和部分单激发态的能级, 分别用绿色、蓝色和粉色表示。图中虚线分别表示 W^{13+} 离子的单电离能和双电离能

Fig. 1. Energy levels of the ground configuration and some single excited states of W^{13+} , W^{14+} and W^{15+} ions are represented by green, blue, and pink, respectively. The dotted lines in the figure represent the single and double ionization energies of W^{13+} ions, respectively.



在本文计算中 4p 和 4s 壳层的 DI 截面很小, 因此本文忽略了这些壳层的贡献。

对于 W^{13+} 离子基态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的 EA 过程, 主要考虑了来自 5s, 4d, 4p 和 4s 壳层的通道, 具体的碰撞激发通道可以表示为



这些激发态可能高于电离能, 可以通过自电离或者辐射衰变的方式重新回到相对较低的能态, 所以需要详细地计算自电离分支比, 其中 n ($n \leq 20$) 和 l' ($l' \leq 6$) 分别表示主量子数和角量子数。

图 2 给出了来自 5s, 4d, 4f 壳层对 DI 截面的贡献, 并且将考虑了组态相互作用 (CI) 和未考虑组态相互作用计算的 DI 截面作了对比。从图 2

可以看到, 4f 壳层对 DI 截面的贡献非常大, 约占总 DI 截面的 80%, 而 5s 壳层对 DI 截面的贡献非常小。红色和蓝色实线分别是包含了组态相互作用的 DI 截面和未包含组态相互作用的 DI 截面, 可以看到组态相互作用对 DI 截面在峰值处的影响大概为 0.4 Mb ($1 \text{ Mb} = 10^{-18} \text{ cm}^2$)。

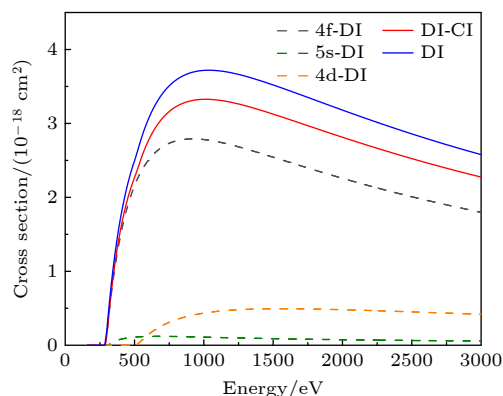


图 2 W^{13+} 离子基态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的 DI 截面。黑色、绿色和橙色虚线分别表示 4f, 5s 和 4d 壳层对总 DI 截面的贡献, 红色实线是包含了组态相互作用的 DI 截面, 蓝色实线表示没有包含组态相互作用的 DI 截面

Fig. 2. DI cross-sections for the ground state $4d^{10}5s^24f^{13}$ of W^{13+} ions. The black, green and orange dashed lines represents the contribution of the 4f, 5s and 4d subshells to the total DI cross-sections, respectively. The red solid line is the DI cross-sections that contain the configuration interaction, and the blue solid line represents the DI cross-sections that do not contain the configuration interaction.

图 3 给出了 5s, 4s, 4d 和 4p 壳层对 EA 截面的贡献。可以清楚地看到对 EA 截面的贡献主要来自 4d 和 4p 壳层, 约占总 EA 截面的 98%, 从图 1 能级图就可以看出, 在单电离能和双电离能之间的

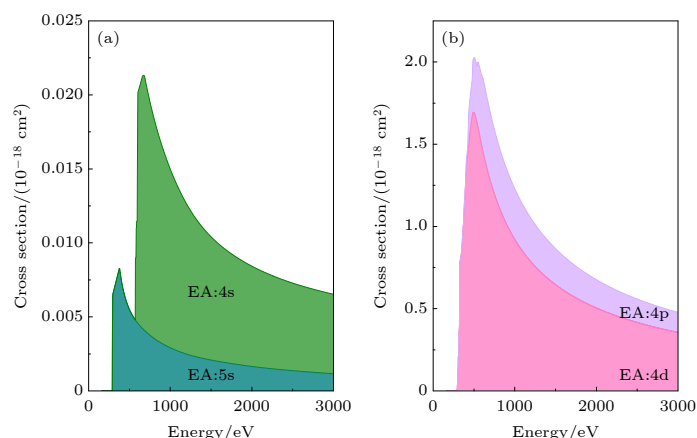


图 3 W^{13+} 离子基态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的 EA 截面 (a) 来自 5s- nl 和 4s- nl 壳层对 EA 截面的贡献; (b) 来自 4p- nl 和 4d- nl 壳层对 EA 截面的贡献

Fig. 3. EA cross-sections for the ground state $4d^{10}5s^24f^{13}$ of W^{13+} ions: (a) The contribution from the 5s- nl and 4s- nl subshells to the EA cross-sections; (b) the contribution from the 4p- nl and 4d- nl subshells to the EA cross-sections.

激发态主要是来自 4d 和 4p 壳层电子的激发, 所以 4d 和 4p 壳层对 EA 截面的贡献也是最主要的. 5s 和 4s 壳层对 EA 截面的贡献非常小, 尤其是 5s 壳层对 EA 截面的贡献几乎可以忽略不计. 这是由于来自 5s 壳层的激发态基本低于第一电离能, 来自 4s 壳层的激发态基本高于第二电离能, 对单电离截面的贡献可以忽略.

图 4 给出了 W^{13+} 离子基态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 包含了 DI 和 EA 截面的总 EISI 截面, 并且与 Schury 等^[15] 的实验结果和他们使用 SCADW 方法计算的结果进行了比较. 从图 4 可以清楚地看到, 当入射电子能量高于 500 eV 时, 本文未考虑组态相互作用的 EISI 截面 (黑线) 和 Schury 等使用 SCADW 方法计算的未乘比例因子的 EISI 截面 (绿线) 高于 Schury 等^[15] 的实验结果 (蓝线). 本文考虑了组态相互作用的 EISI 截面 (红线) 和 Schury 等使用 SCADW 方法计算的乘了比例因子 0.89 的 EISI 截面 (粉线) 与 Schury 等^[15] 的实验结果 (蓝线) 呈现出很好的一致性, 但在接近电离阈值附近存在明显的差异, 造成这种差异的原因是实验中存在长寿命激发态离子, 而计算中并没有考虑亚稳态的贡

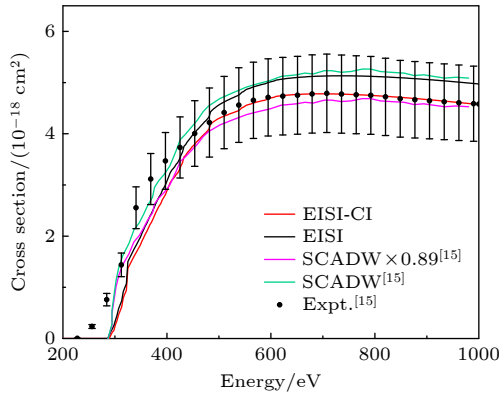


图 4 W^{13+} 离子基态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的总 EISI 截面, 其中黑色实线表示本文没有考虑组态相互作用的 EISI 截面, 红色实线表示本文考虑了组态相互作用的 EISI 截面, 黑色点线表示 Schury 等^[15] 的实验结果, 绿色和粉色分别表示 Schury 等^[15] 使用 SCADW 方法计算的未乘比例因子的结果和乘了比例因子 0.89 的结果

Fig. 4. Total EISI cross-sections for the ground state $4d^{10}5s^24f^{13}$ of W^{13+} ions. The black solid line indicates the EISI cross-sections without considering the configuration interaction, the red solid line indicates the EISI cross-sections with the configuration interaction taken into account, the black dotted line indicates the experimental results of Schury et al.^[15], and the green and pink solid lines are the results calculated by Schury et al. using the SCADW method without multiplying the scaling factor and with multiplying the scaling factor by 0.89, respectively.

献. Jonauskas 等^[37] 也提出若不包含亚稳态的贡献, 这种与实验的一致就没有意义. 因此, 我们需要考虑长寿命亚稳态对 EISI 截面的贡献.

3.1.2 亚稳态 $[Kr]4d^{10}5s^24f^{12}5p$

基于以上结果, 计算长寿命亚稳态对 EISI 截面的贡献是非常有必要的, 首先计算了基组态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 以及激发态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的能级和能级寿命, 由于实验中离子从离子源到相互作用区的飞行时间约为 1.5×10^{-5} s^[37], 因此本文只给出了能级寿命大于 1.5×10^{-5} s 的能级, 计算结果见表 1. 可以看出, 共有 71 个长寿命能级, 这些能级寿命的范围在 3.67×10^{-5} — 2.07 s 之间.

W^{13+} 离子亚稳态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 有 69 个寿命大于 1.5×10^{-5} s 的能级. DI 截面包括了来自 4f, 5s, 5p 和 4d 壳层的贡献, DI 过程的通道可以表示为

$$e^- + [Kr]4d^{10}5s^24f^{12}5p \rightarrow [Kr] \left\{ \begin{array}{l} 4d^{10}5s^24f^{12} \\ 4d^{10}5s^24f^{11}5p \\ 4d^{10}5s4f^{12}5p \\ 4d^95s^24f^{12}5p \end{array} \right\} + 2e^-. \quad (8)$$

对于亚稳态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的电子碰撞激发截面, 我们主要考虑了来自 5s, 4d, 4p 和 4s 壳层的贡献, 具体的激发通道可以表示为

$$e^- + [Ar]3d^{10}4s^24p^64d^{10}5s^24f^{12}5p \rightarrow [Ar]3d^{10} \left\{ \begin{array}{l} 4s^24p^64d^{10}5s4f^{13}5p \\ 4s^24p^64d^95s^24f^{13}5p \\ 4s^24p^54d^{10}5s^24f^{13}5p \\ 4s^14p^64d^{10}5s^24f^{13}5p \\ 4s^24p^64d^{10}5s4f^{12}5p^2 \\ 4s^24p^64d^95s^24f^{12}5p^2 \\ 4s^24p^54d^{10}5s^24f^{12}5p^2 \\ 4s^14p^64d^{10}5s^24f^{12}5p^2 \\ 4s^24p^64d^{10}5s4f^{12}5p5(d,f,g)^1 \\ 4s^24p^64d^95s^24f^{12}5p5(d,f,g)^1 \\ 4s^24p^54d^{10}5s^24f^{12}5p5(d,f,g)^1 \\ 4s^14p^64d^{10}5s^24f^{12}5p5(d,f,g)^1 \\ 4s^24p^64d^{10}5s4f^{12} \\ 4s^24p^64d^95s^24f^{12} \\ 4s^24p^54d^{10}5s^24f^{12} \end{array} \right\} + e^-. \quad (9)$$

表 1 W^{13+} 离子基组态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 和激发态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的能级和能级寿命, 这里我们只给出了寿命大于 1.5×10^{-5} s 的能级. 注意 $a \pm b \equiv a \times 10^{\pm b}$

Table 1. Energy levels and energy level lifetimes for the ground configuration $4d^{10}5s^24f^{13}$ and the excited configuration $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ of W^{13+} ions. Only levels with lifetimes exceeding 1.5×10^{-5} s are presented. Note that $a \pm b \equiv a \times 10^{\pm b}$.

Configuration	Index	Level	$2J$	Energy/eV	Lifetime/s	Index	Level	$2J$	Energy/eV	Lifetime/s
$4d^{10}5s^24f^{13}$	0	$4f_{+}^7 4f_{-}^6$	7	0	—	1	$4f_{-}^5 4f_{+}^8$	5	2.22	$1.14 - 2$
	2	$4f_{+}^6 5p_{-}$	11	12.77	$7.69 - 1$	37	$4f_{+}^6 5p_{+}$	5	31.00	$5.82 - 5$
	3	$4f_{+}^6 5p_{-}$	13	13.48	$2.07 + 0$	38	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	11	31.31	$5.65 - 5$
	4	$4f_{+}^6 5p_{-}$	7	14.09	$4.50 - 1$	39	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	5	31.38	$5.97 - 5$
	5	$4f_{+}^6 5p_{-}$	9	14.47	$2.85 - 1$	40	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	11	31.46	$5.57 - 5$
	6	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	11	15.32	$1.05 - 2$	41	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	7	31.67	$4.60 - 5$
	7	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	9	15.35	$4.30 - 3$	42	$4f_{+}^6 5p_{+}$	3	31.77	$5.31 - 5$
	8	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	7	16.10	$1.55 - 2$	43	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	7	31.91	$5.22 - 5$
	9	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	5	16.44	$1.99 - 2$	44	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	9	31.92	$5.18 - 5$
	10	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	9	16.55	$3.73 - 3$	45	$4f_{+}^6 5p_{+}$	5	32.24	$4.66 - 5$
	11	$4f_{+}^6 5p_{-}$	3	16.62	$5.51 - 2$	46	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	9	32.65	$5.41 - 5$
	12	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	5	16.93	$4.62 - 3$	47	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	1	32.72	$5.53 - 5$
	13	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	7	17.30	$1.93 - 3$	48	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	3	32.82	$4.38 - 5$
	14	$4f_{-}^4 5p_{-}$	9	18.17	$3.74 - 3$	49	$4f_{+}^6 5p_{+}$	7	32.86	$5.66 - 5$
	15	$4f_{-}^4 5p_{-}$	7	19.33	$1.02 - 3$	50	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	5	33.12	$5.54 - 5$
	16	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	3	19.53	$3.57 - 3$	51	$4f_{-}^4 5p_{+}$	11	33.33	$5.84 - 5$
	17	$4f_{+}^6 5p_{-}$	5	19.73	$2.35 - 3$	52	$4f_{-}^4 5p_{+}$	7	33.40	$5.37 - 5$
	18	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	13	20.76	$1.11 - 2$	53	$4f_{-}^4 5p_{+}$	9	33.68	$6.08 - 5$
	19	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	1	20.97	$2.38 - 2$	54	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	5	34.49	$5.03 - 5$
	20	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	11	21.07	$1.24 - 2$	55	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	15	34.87	$6.55 - 5$
	21	$4f_{+}^6 5p_{-}$	1	21.10	$8.16 - 3$	56	$4f_{-}^4 5p_{+}$	3	35.32	$4.23 - 5$
	22	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{-}$	3	21.91	$1.38 - 3$	57	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	9	35.34	$3.87 - 5$
	23	$4f_{-}^4 5p_{-}$	5	22.19	$1.31 - 3$	58	$4f_{+}^6 5p_{+}$	7	35.59	$5.41 - 5$
	24	$4f_{-}^4 5p_{-}$	3	22.70	$8.31 - 4$	59	$4f_{+}^6 5p_{+}$	1	35.76	$5.04 - 5$
	25	$4f_{+}^6 5p_{+}$	15	27.41	$6.72 - 5$	60	$4f_{+}^6 5p_{+}$	3	36.41	$4.96 - 5$
	26	$4f_{+}^6 5p_{+}$	9	28.45	$6.04 - 5$	61	$4f_{-}^4 5p_{+}$	5	36.59	$4.72 - 5$
	27	$4f_{+}^6 5p_{+}$	11	28.47	$5.00 - 5$	62	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	11	37.45	$4.58 - 5$
	28	$4f_{+}^6 5p_{+}$	13	29.23	$5.63 - 5$	63	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	1	37.64	$4.16 - 5$
	29	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	7	29.32	$5.95 - 5$	64	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	5	37.84	$5.21 - 5$
	30	$4f_{+}^6 5p_{+}$	9	29.38	$6.14 - 5$	65	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	13	37.86	$5.25 - 5$
	31	$4f_{-}^4 5p_{-}$	1	29.65	$2.51 - 4$	66	$4f_{+}^6 5p_{+}$	3	37.98	$4.77 - 5$
	32	$4f_{+}^6 5p_{+}$	5	29.74	$5.56 - 5$	67	$4f_{-}^4 5p_{+}$	7	38.06	$5.40 - 5$
	33	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	13	29.88	$6.27 - 5$	68	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	3	38.78	$4.57 - 5$
	34	$4f_{+}^6 5p_{+}$	7	30.01	$5.64 - 5$	69	$4f_{-}^4 5p_{+}$	1	39.58	$3.67 - 5$
	35	$4f_{+}^6 5p_{+}$	11	30.04	$5.70 - 5$	70	$4f_{-}^4 5p_{+}$	3	45.70	$4.06 - 5$
	36	$4f_{-}^5 4f_{+}^7 5p_{+}$	9	30.73	$5.02 - 5$					

由表 1 可知, 我们的计算包含了 W^{13+} 离子基组态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 和激发组态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 在内的能级寿命大于 1.5×10^{-5} s 的 71 个能级, 通过分析

基态的 EISI 截面发现, 考虑组态相互作用的结果更接近实验值, 所以在计算以上这 71 个能级的 EISI 截面时同样考虑了组态相互作用, 如图 5 所示.

图 5(a) 是基组态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的两个能级的 EISI 截面, 图 5(b) 是激发组态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的 69 个能级的 EISI 截面. 为了便于清楚地看见这些能级的 EISI 截面的变化情况, 我们用实线给出了其中 5 个 (2, 22, 30, 69 和 70, 这些序号表示的具体能级见表 1) 能级的 EIS 截面, 其他用虚线表示. 从图 5 可以看到, 基组态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的两个能级的 EISI 截面几乎一样. 而亚稳态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的 69 个能级的 EISI 截面随着能级序号的增加, EISI 截面逐渐增大, 电离能逐渐减小, 第 70 个能级的电离能约为 250 eV, 比 W^{13+} 离子基态的电离能约低 40 eV.

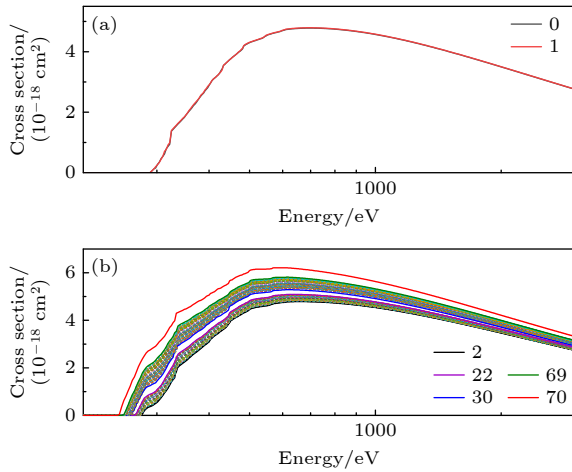


图 5 W^{13+} 离子的共 71 个能级的 EISI 截面 (a) 基组态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 的 EISI 截面; (b) 长寿命激发态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的 EISI 截面. 图例中的这些序号所表示的具体能级见表 1, 图中横轴采用了坐标轴

Fig. 5. EISI cross-sections of 71 energy levels of the W^{13+} ions: (a) EISI cross-sections of the ground configuration $4d^{10}5s^24f^{13}$; (b) EISI cross-sections of the long-lived metastable configuration $4d^{10}5s^24f^{12}5p$. The specific energy levels indicated by these ordinal numbers in the legend are shown in Table 1, and logarithmic coordinates have been used for the horizontal axis of the figure.

3.2 总截面

基于 Schury 等 [15] 的实验结果以及本文计算的基态 EISI 截面, 我们发现在低于单电离能处就出现了电离截面, 为了重现实验截面, 不仅需要考考虑 W^{13+} 离子基组态的 EISI 截面, 还需要考虑长寿命亚稳态的 EISI 截面. 由于实验中无法确定长寿命亚稳态所占的分数, 本文通过下面的理论模型详细地计算了每个能级所占的分数, 该理论方法的合理性在之前的 W^{8+} — W^{10+} 的计算工作中得到了验证 [28,35]. 具体的公式如下 [37]:

$$f(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) = \left[\sigma^{\text{exp}}(E_e) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \sigma_i^{\text{th}}(E_e) \right]^2. \quad (10)$$

这 71 个能级的拟合系数如表 2 所列.

表 2 W^{13+} 离子理论模拟 71 个长寿命能级所占的分数 (能级序号详见表 1)

Table 2. Theory simulates the fraction of W^{13+} ions from 71 long-lived energy levels (see Table 1 for details of energy level No.0–No.70).

Index	f	Index	f	Index	f	Index	f
0	0.35	18	0.01	36	0.01	54	0.01
1	0.005	19	0.01	37	0.01	55	0.01
2	0.01	20	0.01	38	0.01	56	0.01
3	0.01	21	0.01	39	0.01	57	0.01
4	0.01	22	0.01	40	0.01	58	0.01
5	0.01	23	0.01	41	0.01	59	0.01
6	0.01	24	0.01	42	0.01	60	0.01
7	0.01	25	0.01	43	0.01	61	0.01
8	0.01	26	0.01	44	0.01	62	0.005
9	0.01	27	0.01	45	0.01	63	0.005
10	0.01	28	0.01	46	0.01	64	0.005
11	0.01	29	0.01	47	0.01	65	0.005
12	0.01	30	0.01	48	0.01	66	0.005
13	0.01	31	0.01	49	0.01	67	0.005
14	0.01	32	0.01	50	0.01	68	0.005
15	0.01	33	0.01	51	0.01	69	0.005
16	0.01	34	0.01	52	0.01	70	0.005
17	0.01	35	0.01	53	0.01		

在获得了 71 个长寿命能级所占的分数之后, 将这 71 个能级理论模拟的 EISI 截面和 Schury 等 [15] 实验结果进行比较, 如图 6 所示, 在入射电子能低于 500 eV 时, 本文拟合的结果与 Schury 等的

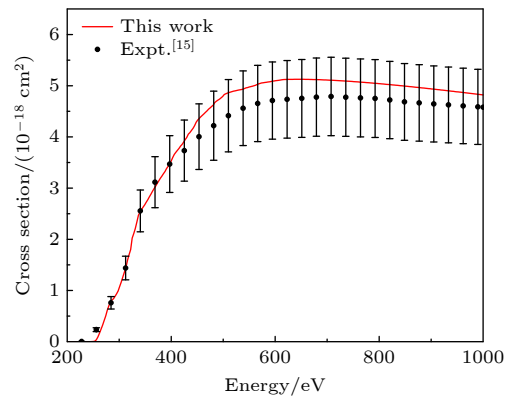


图 6 W^{13+} 离子理论拟合的 EISI 截面. 红色实线是本文计算的结果, 黑色点线是 Schury 等 [15] 的实验结果

Fig. 6. The EISI cross-sections fitted by theory of the W^{13+} ions. The red solid line is the results of the calculations in this work, and the black dotted line is the experimental results of Schury et al. [15].

实验结果吻合得很好. 在入射电子能高于 500 eV 时, 本文拟合的结果略高于实验值, 但在误差允许的范围内, 造成这种现象的原因是亚稳态具有开放的 4f 壳层, 涉及的组态数目非常大, 利用 LLDW 方法并不能完全考虑所有组态间的相互作用.

4 总结与讨论

本文利用 LLDW 方法计算了 W^{13+} 离子基组态 $4d^{10}5s^24f^{13}$ 和亚稳态 $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ 的 EISI 截面, 主要包括 DI 截面和 EA 截面. 通过与 Schury 等^[15] 实验结果的比较发现在阈值附近处只考虑基态的 EISI 截面与实验测量结果相差很大, 正如实验预测的一样, 长寿命亚稳态对 EISI 截面也有着重要的贡献. 为了更好地拟合实验结果, 进一步计算了激发态的能级和能级寿命, 并对能级寿命大于 1.5×10^{-5} s 的 71 个能级的 EISI 截面进行了详细地计算, 利用理论模型估计了长寿命亚稳态能级在 EISI 截面中所占的分数. 我们发现在考虑了亚稳态 EISI 截面的贡献之后, 本文计算结果和实验结果吻合得更好.

参考文献

- [1] Müller A 2008 *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **55** 293
- [2] Dai J, Hou Y, Yuan J 2010 *Phys. Rev. Lett* **104** 245001
- [3] Nakamura N, Tobiyama H, Nohara H, Kato D, Watanabe H, Currell F J, Ohtani S 2006 *Phys. Rev. A* **73** 020705
- [4] Jin F, Borovik A, Ebinger B, Schippers S 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 075201
- [5] Zhang D H, Kwon D H. 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 075202
- [6] Kynienė A, Merkelis G, Šukys A, Masys Š, Pakalka S, Kisieliū R, Jonauskas V 2018 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51** 155202
- [7] Müller A 2015 *Atoms* **3** 120
- [8] Bao R J, Wei J K, Li B W, Chen X M 2022 *Atoms* **10** 92
- [9] Montague R G, Harrison M F A, Smith A C H 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **17** 3295
- [10] Stenke M, Aichele K, Harthiramani D, Hofmann G, Steidl M, Volpel R, Salzborn E 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 2711
- [11] Stenke M, Aichele K, Harthiramani D, Hofmann G, Steidl M, Volpel R, Shevelko V P, Tawara H, Salzborn E 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 4853
- [12] Rausch J, Becker A, Spruck K, Hellhund J, Schippers S, Borovik A, Huber K, Müller A 2012 *J. Phys. Conf. Ser.* **388** 062022
- [13] Spruck K, Becker A, Borovik A, Gharaibeh M F, Rausch J, Schippers S, Müller A 2014 *J. Phys. Conf. Ser.* **488** 062026
- [14] Borovik A, Ebinger B, Schury D, Schippers S, Müller A 2016 *Phys. Rev. A* **93** 012708
- [15] Schury D, Borovik A, Ebinger B, Jin F, Spruck K, Müller A, Schippers S 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 015201
- [16] Scott N S, Burke P G. 1980 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13** 4299
- [17] Ma Y, Liu L, Wu Y, Qu Y, Wang J 2020 *Phys. Rev. A* **101** 052703
- [18] Munoz Burgos J M, Loch S D, Ballance C P, Boivin R F 2009 *A&A* **500** 1253
- [19] Li F, Liang G Y, Bari M A, Zhao G 2013 *A&A* **556** A32
- [20] Pindzol M S, Loch S D. 2019 *Eur. Phys. J. D* **73** 78
- [21] Hu S X 2007 *Phys. Rev. Lett* **98** 133201
- [22] Pindzola M S, Abdel-Naby S A, Colgan J P 2019 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **52** 095201
- [23] Colgan J, Pindzola M S, Childers G, Khakoo M A 2006 *Phys. Rev. A* **73** 042710
- [24] Loch S D, Ludlow J A, Pindzola M S, Whiteford A D, Griffin D C 2005 *Phys. Rev. A* **72** 052716
- [25] Borovik A, Gharaibeh M F, Hillenbrand P M, Schippers S, Müller A 2013 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **46** 175201
- [26] Borovik A, Brandau C, Jacobi J, Schippers S, Müller A 2011 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44** 205205
- [27] Zhang D H, Xie L Y, Jiang J, Wu Z W, Dong C Z, Shi Y L, Qu Y Z 2018 *Chin. Phys. B* **27** 053402
- [28] Bao R J, Wei J K, Chen L, Li B W, Chen X M 2023 *Chin. Phys. B* **32** 063401
- [29] Liu P F, Liu Y P, Zeng J L, Yuan J M 2014 *Phys. Rev. A* **89** 042704
- [30] Jonauskas V 2019 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **239** 106659
- [31] Zhang F, Ding X, Gao C, Zhang D, Zeng J, Dong C 2024 *Phys. Scr.* **99** 035409
- [32] Pindzola M S, Griffin D C. 1997 *Phys. Rev. A* **56** 1654
- [33] Pindzola M S, Loch S D. 2016 *Phys. Rev. A* **93** 062709
- [34] Jin F, Borovik A, Ebinger B, Schippers S 2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 175201
- [35] Zhang S P, Zhang F J, Zhang D H, Ding X B, Jiang J, Xie L Y, Ma Y L, Li M J, Sikorski M, Dong C Z 2024 *Chin. Phys. B* **33** 033401
- [36] Chen L, Li B, Chen X 2022 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **285** 108179
- [37] Jonauskas V, Kynienė A, Kučas S, Pakalka S, Masys S, Pranciševičius A, Borovik A, Gharaibeh M F, Schippers S, Müller A 2019 *Phys. Rev. A* **100** 062701
- [38] Gu M F 2004 *AIP Conference Proceedings* **730** 120
- [39] Kwon D H, Savin D W 2012 *Phys. Rev. A* **86** 022701
- [40] Kynienė A, Kučas S, Pakalka S, Masys S, Jonauskas V 2019 *Phys. Rev. A* **100** 052705
- [41] Chen M H, Reed K J, Moores D L 1990 *Phys. Rev. Lett* **64** 1350
- [42] Atomic Spectra Database, NIST 2009 <https://dx.doi.org/10.18434/T4W30F>

Theoretical study on electron-impact single ionization cross-section of W^{13+} ion*

ZHANG Shiping¹⁾²⁾ ZHANG Fangjun¹⁾⁴⁾ LI Maijuan¹⁾ ZHANG Denghong^{1)3)†}

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

2) (Wu Wei No.8 Middle School, Wuwei 733000, China)

3) (Department of Physics, Tianshui Normal University, Tianshui 741001, China)

4) (College of Computer and Artificial Intelligence, Lanzhou Institute of Technology, Lanzhou 730070 China)

(Received 17 September 2025; revised manuscript received 22 October 2025)

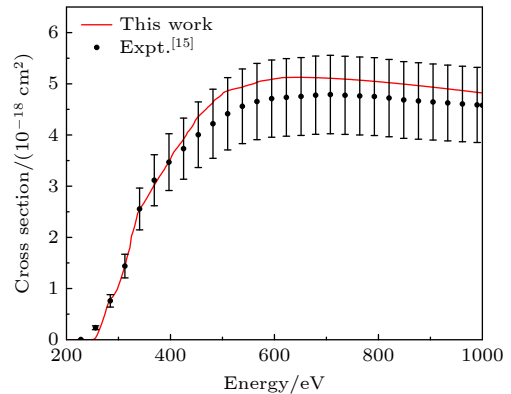
Abstract

Electron-ion collision is one of the fundamental processes in atomic and molecular physics, and the study of this process can provide insight into the mechanism of electron-atom/ion interaction. It has important applications in plasma physics and astrophysics. Accurate electron-impact cross-sections are important in plasma modeling. In general, total electron impact single ionization (EISI) cross-section is contributed from the direct ionization (DI) and the indirect ionization processes, with the latter further divided into excitation auto-ionization (EA), resonant excitation double auto-ionization (REDA), and resonant excitation auto-double ionization (READI) processes.

In this work, the EISI cross-section for the ground state $[Kr] 4d^{10}5s^24f^{13}$ of W^{13+} ions is calculated in detail by using the level-to-level distorted-wave (LLDW) method, which mainly includes the contributions of direct ionization (DI) and excited auto-ionization (EA) cross-sections to the EISI cross-section.

Our computational results indicate that when configuration interaction is considered, the calculated values show excellent agreement with experimental data for electron impact energies exceeding 500 eV. However, significant discrepancies still exist near the ionization threshold. It is confirmed that these discrepancies primarily originate from the presence of long-lived metastable ions.

To achieve better agreement with experimental observations, we further calculate EISI cross-sections for 71 energy levels of the metastable state $4d^{10}5s^24f^{12}5p$ with lifetimes longer than 1.5×10^{-5} s. The total EISI cross-sections of these 71 energy levels are obtained through theoretical fitting and compared with the experimental results by Schury et al. (2020 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** 015201). It is found that our results are in good agreement with the experimental results of Schury et al. after considering the contribution of long-lived metastable.



Keywords: tungsten ions, electron-impact single ionization, metastable states, direct ionization, excitation auto-ionization

DOI: [10.7498/aps.75.20251275](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251275)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251275](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251275)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12364034, 12464036) and the Science and Technology Project of Gansu Province, China (Grant No. 23YFFA0074).

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

W^{13+} 离子的电子碰撞单电离截面的理论研究

张世平 张芳军 李麦娟 张登红

Theoretical study on electron-impact single ionization cross-section of W^{13+} ion

ZHANG Shiping ZHANG Fangjun LI Maijuan ZHANG Denghong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 030302 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251275

CSTR: 32037.14.aps.75.20251275

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251275>

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

W^{6+} 离子的电子碰撞电离研究

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

物理学报. 2024, 73(12): 123401 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240408>

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>

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>

热稠密等离子体中 Fe^{25+} 离子光电离截面的低能特征

Low-energy characteristics of photoionization cross section for Fe^{25+} ion embedded in hot dense plasma

物理学报. 2025, 74(11): 113202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250168>

自由电子激光制备高强度亚稳态氦原子和类氦离子

Free electron laser prepared high-intensity metastable helium and helium-like ions

物理学报. 2024, 73(15): 150201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240554>

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>