

高离化态类镍离子电子碰撞激发过程的 相对论扭曲波理论研究^{*}

颢录有¹⁾ 张志远¹⁾ 董晨钟^{1)†} 蒋 军¹⁾

1) 西北师范大学物理与工程学院, 兰州 730070)

2) 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心, 兰州 730000)

(2008 年 3 月 31 日收到, 2008 年 4 月 25 日收到修改稿)

利用相对论扭曲波方法和新发展的研究电子碰撞激发过程的计算程序 REIE06, 系统计算了电子碰撞激发高离化态类镍 Gd^{36+} 和 $\text{Rn}^{58+} \rightarrow \text{U}^{64+}$ ($Z = 86-92$) 离子从基态到 $4f$ ($l = s, p, d, f$) 次壳层精细结构能级的碰撞强度和截面. 研究了随等电子系列变化时, 从基态到与 X 射线激光有关的 $3d^9 4p$ 和 $3d^9 4d$ 激发态能级的电子碰撞激发截面随 Z 的变化, 讨论了强的组态相互作用对高离化态类镍离子截面的影响. 通过对 Gd^{36+} 离子涉及 X 射线激光跃迁的相关能级电子碰撞激发速率系数的计算, 分析了等离子体中电子温度对碰撞过程的影响. 同时, 目前部分计算结果与以往的理论结果进行了比较, 得到了很好的一致性.

关键词: 电子碰撞激发, 相对论扭曲波方法, 高离化态类镍离子

PACC: 3480D, 3120, 3130

1. 引 言

电子与高离化态离子碰撞激发过程的研究是当前原子物理学研究的热点课题. 一方面, 高精度的电子碰撞激发强度、截面以及速率系数是理论模拟和诊断各种实验室和天体高温等离子体急需的参数^[1-5]; 另一方面, 利用动能较大的电子来碰撞激发由高 Z 元素组成的等离子体, 是获得较短波长, 特别是“水窗”波段 X 射线激光的重要途径^[6,7]. 对于高 Z 高离化态的离子, 理论上要得到精确的电子碰撞激发参数, 许多物理效应需要考虑: 1) 当 $Z > 30$ 时, 相对论效应对径向波函数的影响非常重要, 理论处理需要基于 Dirac 方程基础上进行; 2) 随着 Z 的增大, Breit 相互作用对碰撞强度的影响逐渐增大, 计算中需要系统考虑^[8]; 3) 电子关联效应不仅影响靶离子的波函数和跃迁属性, 也影响碰撞参数的精确计算; 4) 许多研究已表明, 自电离共振贡献对截面和速率系数的影响也非常重要, 其可以使近阈截面提高几倍甚至 1—2 数量级^[9].

目前, 研究电子碰撞激发过程的理论主要有 R-Matrix 方法^[10,11], Close-Coupling (CC) 方法^[12], 平面波玻恩近似 (PWB)^[13] 以及扭曲波方法 (DW)^[14]. 与其他理论相比, 扭曲波方法由于其在计算方面的简捷性和快速性, 是人们获取大量等离子体诊断参数使用最广泛的方法之一. 自 20 世纪 90 年代以来, 为满足新的实验以及实际应用研究的需要, 国际上许多研究小组已经先后发展了相对论的扭曲波方法 (RDW) 以及计算程序并用以研究电子与高 Z 离子的碰撞^[3-5,15]. 与国外相比, 国内相关的研究虽然开展较早, 但采用的方法多限于非相对论或者准相对论的扭曲波方法, 对各种物理效应的考虑也比较有限^[14,15]. 近年来, 随着高能加速器的冷却储存环、电子束离子阱 (EBIT) 以及电子离子合并束能量损失技术 (MEIBEL) 等实验装置和技术的发展, 大量高精度的电子与高离化态离子碰撞过程的实验研究已成为可能. 因此, 发展相对论的理论方法, 进行高离化态离子电子碰撞过程的理论研究具有重要的意义.

最近, 在相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论方法^[16-18] 的基础上, 我们新发展了一套研究电子与

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10434100, 10774122), 科技部国际合作项目 (批准号: CI-2004-07), 高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20070736001) 和西北师范大学科技创新工程项目 (批准号: NWNNU-KJCXGC-03-21) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

原子(离子)碰撞激发过程的全相对论扭曲波(RDW)方法和计算程序 REIE06^[19]. 目前的方法不仅可以系统地考虑相对论效应和电子的关联效应,包括束缚-束缚和束缚-连续电子间的交换效应,同时也能考虑 Breit 相互作用以及高分波的贡献对碰撞强度的影响. 作为对新的方法和程序的检验,同时提供天体、等离子体物理和 X 射线激光等实验和应用研究大量需求的碰撞参数,本文系统计算了类镱 Gd^{36+} 和 $\text{Rn}^{58+} \rightarrow \text{U}^{64+}$ ($Z = 86-92$) 离子从基态到 106 个较低激发态的电子碰撞激发强度和截面,分析了 Breit 相互作用对碰撞强度的影响. 另外,以 $4d-4p$ ($J = 0-1$) 的 X 射线激光跃迁为例,讨论了随等电子系列变化时,电子碰撞激发截面随原子序数的变化规律,同时也研究了涉及能级交叉时,强组态相互作用对碰撞激发截面的影响.

2. 理论方法

2.1. 靶离子和连续电子波函数的计算

目前理论中,靶离子的波函数采用了多组态 Dirac-Fock 理论方法的波函数^[16-18]. 其中,任意一个原子态的波函数 $|\alpha(P, J, M)\rangle$ 由具有相同宇称 P , 总角动量 J 和总角动量磁分量 M 的组态波函数线性组合而成,即

$$|\alpha(P, J, M)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(P, J, M)\rangle, \quad (1)$$

式中 n_c 为组态波函数的个数, $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数, $|\Gamma_r(P, J, M)\rangle$ 为组态波函数,其由单电子的 Dirac 自旋轨道波函数构成的 N 阶 Slater 行列式线性组合而成. 具体计算中,通过活动空间方法系统性地扩大 n_c 以细致考虑电子关联效应,以及作为微扰考虑 Breit 相互作用、QED 效应等对波函数的修正^[20], 单电子的自旋轨道波函数、组态波函数以及靶离子原子态的波函数可以用国际上广泛使用的计算原子结构的程序包 GRASP92^[17] 得到.

在相对论框架下,连续电子的波函数采用了相似与束缚电子的相对论 Dirac 自旋轨道波函数^[3,4], 可表示为

$$u_{\epsilon k m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{\epsilon k}(r) \chi_{k m}(\theta, \phi) \\ i Q_{\epsilon k}(r) \chi_{-k m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中 ϵ 为连续电子的动能, k 为相对论量子数, 对应于 $l = j \pm 1/2$, $k = \pm(j + 1/2)$, m 为磁量子数;

$\chi_{k m}(\theta, \phi)$ 为自旋球谐函数, $P_{nk}(r)$ 和 $Q_{nk}(r)$ 分别为径向波函数的大小分量, 其满足耦合的 Dirac 方程^[3,4]

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) P_{\epsilon k}(r) \\ & - \left(2c - \frac{\epsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) Q_{\epsilon k}(r) = - \frac{\chi^{(P)}(r)}{r}, \\ & \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) Q_{\epsilon k}(r) \\ & + \left(-\frac{\epsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) P_{\epsilon k}(r) = \frac{\chi^{(Q)}(r)}{r}. \end{aligned} \quad (3)$$

耦合 Dirac 方程的求解采用了相似于处理束缚电子态的迭代自洽的方法, 计算中细致考虑了连续电子与束缚电子间的直接效应和交换效应^[2-4], 而连续电子波函数的归一化采用了 WKB 近似方法^[21].

2.2. 电子碰撞激发强度和截面的计算

具有一定能量 ϵ (Ry) 的自由电子与靶离子碰撞, 使其从初态 i 激发到末态 f 的碰撞激发截面为

$$Q_{if}(\epsilon) = \frac{\pi a_0^2}{k_i^2 g_i} \Omega_{if}(\epsilon), \quad (4)$$

式中, a_0 为波尔半径, k_i 为入射电子的相对论波数, g_i 为靶离子初态的统计权重, $\Omega_{if}(\epsilon)$ 为碰撞激发强度. 入射电子的相对论波数 k_i 与能量 ϵ 的关系为

$$k_i^2 = \epsilon \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} \epsilon \right]. \quad (5)$$

碰撞激发强度可以表示为

$$\begin{aligned} \Omega_{if}(\epsilon) = & 8 \sum_J (2J+1) \sum_{\kappa, \kappa'} \\ & \times \left| \gamma_i J_i \epsilon_i \kappa_i ; J \middle| \sum_{q, qp}^{N+1} \left(\frac{1}{r_{qp}} + V_{\text{Breit}} \right) \right. \\ & \times \left. \middle| \gamma_f J_f \epsilon_f \kappa_f ; J \right|^2, \end{aligned} \quad (6)$$

式中, J 为碰撞体系(电子+靶离子)的总角动量子数, κ 和 κ' 为入射和散射电子的相对论量子数. V_{Breit} 为广义的 Breit 相互作用算符^[8], 在涉及高 Z 离子碰撞激发截面的计算中, Breit 相互作用的影响不能忽略. $|\gamma_i J_i \epsilon_i \kappa_i ; J|$ 和 $|\gamma_f J_f \epsilon_f \kappa_f ; J|$ 分别为碰撞体系初、末态的波函数. 为了考虑电子的交换, 碰撞体系初、末态的波函数采用了连续电子与靶离子波函数乘积构成的反对称化的耦合波函数

$$|\gamma_i J_i \epsilon_i \kappa_i ; J\rangle = \frac{1}{(N+1)^{1/2}} \sum_{p=1}^N (-1)^{N+1-p}$$

$$\times \sum_{M_i, m} \alpha(J_i, jM_i, m; JM) |\alpha(P_i, J_i, M_i) |_{\epsilon km} \quad , \quad (7)$$

式中, $\alpha(J_i, jM_i, m; JM)$ 是 CG 系数, $|\alpha(P_i, J_i, M_i)$ 为靶离子的波函数, i 代表靶离子($t = i$ 为初态, $t = f$ 为末态), $|\epsilon km$ 为连续电子的波函数.

2.3. 速率系数的计算

在等离子体环境中,假定电子的速率满足 Maxwell 分布,则电子碰撞激发的速率系数为

$$C_{if} = \frac{2\sqrt{\pi} \alpha a_0^2}{g_i} \sqrt{\frac{I_H}{kT_e}} \exp\left(-\frac{\Delta E_{if}}{kT_e}\right) \gamma_{if} \quad , \quad (8)$$

式中, g_i 为碰撞激发初态的统计权重, I_H 为氢原子的电离能, T_e 为电子的温度, k 为 Boltzmann 常数, ΔE_{if} 为激发能, γ_{if} 为有效碰撞强度,

$$\gamma_{if} = \int_0^\infty \Omega_i(\epsilon) \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT_e}\right) d\left(\frac{\epsilon}{kT_e}\right) \quad , \quad (9)$$

式中, $\Omega_i(\epsilon)$ 为从初态 i 到末态 f 的碰撞强度, ϵ 为散射电子的能量.

3. 结果与讨论

3.1. 碰撞激发强度的比较

类镍离子有 28 个电子,基组态为 $3s^2 3p^6 3d^{10}$. 由于其稳定的闭壳层结构,是高温等离子体中主要的电离态之一,也是产生 X 射线激光最重要的体系^[6,7]. 通过与自由电子碰撞,从 $3l$ ($l = s, p, d$) 激发一个电子到 $4l'$ ($l' = s, p, d, f$) 可形成 12 个激发组态 $3l^{-1} 4l'$, 共 106 个精细结构能级. 利用 GRASP92 计算程序包^[17], 在 EAL 能级优化模式^[17] 下本文首先计算了类镍 Gd^{36+} 和 $Rn^{58+} - U^{64+}$ 离子 107 个精细结构的能级及其波函数. 然后, 利用新发展的相对论电子碰撞激发程序 REIEO6^[19], 计算了不同入射电子能量下, 从基态到 106 个激发态的碰撞激发强度和截面. 为了确保分波的收敛性, 计算中入射(或散射)电子的最大相对论量子数选取了 $k = 50$.

为了检验目前理论方法和计算程序的正确性和精确性, 我们分别对中 Z 类镍 Gd^{36+} 和高 Z 类镍 U^{64+} 离子的计算结果, 包括激发能和电子碰撞激发强度与以往 Chen^[5], Zhang 等人^[22] 和 Hagelstein^[23] 的理论结果进行了比较. 由于涉及的数据较多, 限于篇幅, 本文仅给出了 U^{64+} 离子的结果, 见表 1. 通过比较, 结果表明无论是对离化度较低的 Gd^{36+} 离子, 还

是离化度很高的 U^{64+} 离子, 目前计算的激发能与文献^[5, 22, 23] 的结果都符合的很好, 最大相对偏差不超过 0.27%. 对于碰撞激发强度, 表 1 中给出了 U^{64+} 离子当散射电子能量 ϵ_f 分别选取 400 和 10000 eV, 并且计算中分别考虑和不考虑 Breit 相互作用贡献两种情况下的结果. 从表 1 可以看出, 对于不同的电子碰撞激发末态, Breit 相互作用对碰撞强度的影响不同. 在相同散射电子能量的情况下, 考虑 Breit 相互作用后一些激发态的碰撞强度会增大, 相反另一些激发态的碰撞强度会减小. 另外, 我们发现碰撞体系中散射电子能量的改变和靶离子的改变, 都对 Breit 相互作用的结果有影响, 然而散射电子能量改变时的影响通常很小, 但靶离子变化时影响比较大. 例如, 比较 Gd^{36+} 和 U^{64+} 离子考虑和不考虑 Breit 相互作用贡献时碰撞强度的结果, 我们发现对于 Gd^{36+} 离子, 考虑 Breit 相互作用后, 所有能级的碰撞强度相比不考虑 Breit 相互作用时改变了 0.1%—10%; 而对于 U^{64+} 离子, 考虑 Breit 相互作用后, 碰撞激发强度普遍改变了 0.1%—20%, 有些能级甚至超过了 50%. 这说明, 原子序数 Z 越大, Breit 相互作用对碰撞强度的影响越重要. 因此, 在涉及高 Z 离子电子碰撞激发参数的精确计算中, Breit 相互作用的贡献必须予以细致考虑. 另外, 比较细致考虑 Breit 相互作用后的结果和 Chen^[5] 以及 Zhang 等人^[22] 的理论计算结果可以发现, 对于 Gd^{36+} 离子, 目前结果与以往理论计算都符合的比较好, 相对偏差普遍低于 10%; 对于 U^{64+} 离子, 不同理论计算结果之间本身偏差较大, 目前结果与以往计算相比, 相对偏差普遍低于 15%. 另外, 目前工作进一步包括了以往理论研究没有涉及的内壳层 $3s, 3p$ 电子激发到 $4l$ ($l = s, p, d, f$) 次壳层激发能和碰撞强度的计算. 从表 1 可以看出, 类镍离子内壳层电子的碰撞激发强度同样比较大. 因此, 在实验室和天体高温等离子体状态的诊断和光谱的理论模拟中, 内壳层电子碰撞激发参数同样非常重要.

3.2. X 射线激光关联能级的激发截面和速率系数

通过电子碰撞激发, 实现类镍离子 $3d^9 4p$ 和 $3d^9 4d$ 能级间粒子数反转, 是实验室产生 X 射线激光最重要的手段之一^[6,7]. 实验研究表明, 类镍离子 $4d-4p$ 的激光跃迁中, $J = 0 \rightarrow 1$ 的跃迁最强, 激光增益也最大^[6]. 在原子理论的 JJ 耦合下 $3d^9 4d$ ($J = 0$)

的能级有两个,即 $(3d_{5/2}4d_{5/2})_0$ 和 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$; $3d^94p$ ($J=1$)的能级有三个,即 $(3d_{3/2}4p_{1/2})_1$ 、 $(3d_{5/2}4p_{3/2})_1$ 和 $(3d_{3/2}4p_{3/2})_1$. 为了研究高 Z 靶离子对碰撞激发截面的影响,我们计算了相同入射电子能量($\epsilon=4000$ eV)时,不同类镍离子 $Rn^{58+}-U^{64+}$ ($Z=86-92$)从基态到上述五个与 X 射线激光有关的激发态能级的碰撞激发截面,结果见图 1. 从图 1 可以看出,对于高 Z ($Z=86-92$)类镍离子, $4d$ 与 $4p$ 激发态相比, $4d$ 激发态明显具有较大的碰撞激发截面,而且随着原子序数 Z 的增大, $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 激发态的截面逐渐减小, $(3d_{5/2}4d_{5/2})_0$ 激发态的截面逐渐增大; 对于三个 $4p$ 激发态,电子碰撞激发截面都非常接近,随 Z 基本没有变化. 另外,作为比较,图 1 中也给出了一些目前实验和理论研究普遍感兴趣的中 Z 类镍 Nd^{32+} 、 Sm^{34+} 和 Gd^{36+} 离子的电子碰撞激发截

面. 近年来,尽管涉及高 Z 类镍 X 射线激光的研究仍然处于理论阶段,但在一些中 Z 类镍离子中,例如 Nd ($Z=60$)、 Sm ($Z=62$)、 Gd ($Z=64$)、 Tb ($Z=65$) 以及 Dy ($Z=66$)元素的类镍离子中,利用电子碰撞激发机理已经从实验中获得了波长为 $6-8$ nm 的软 X 射线激光^[24-25]. 比较中 Z 和高 Z 离子的碰撞激发截面,从图 1 可以看出,中 Z 离子 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 激发态的截面普遍要比 $4p$ 激发态的截面大 5 到 10 倍,也远远大于高 Z ($Z=86-92$)离子相同激发态的截面. 随着 Z 的逐渐增大,除 $(3d_{5/2}4d_{5/2})_0$ 激发态的截面逐渐增大外, $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 激发态以及所有 $4p$ 激发态的截面都逐渐减小. 这说明,对于高 Z 的类镍离子利用电子碰撞激发机制尽管可以获得更短波长的 X 射线激光,但与中 Z 类镍离子相比,激光的增益会受到很大的影响.

表 1 类镍 U^{64+} 离子从基态 $3d^{10}1S_0$ 到 $3l^{-1}4l$ 激发态电子碰撞激发强度的比较

序号	组态	能级	激发能 /eV	碰撞强度							
				$\epsilon_f=400$ eV				$\epsilon_f=10000$ eV			
				不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用	文献 5]		不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用	文献 5]	文献 22]
1	$3d^{10}$	$1S_0$	0.00								
2	$3d^94s$	$(5/2, 1/2)_3$	2687.72	3.17×10^{-4}	3.41×10^{-4}	3.32×10^{-4}	3.28×10^{-4}	7.22×10^{-5}	8.19×10^{-5}	8.07×10^{-5}	7.95×10^{-5}
3	$3d^94s$	$(5/2, 1/2)_2$	2690.27	1.07×10^{-3}	1.11×10^{-3}	1.15×10^{-3}	1.10×10^{-3}	1.42×10^{-3}	1.57×10^{-3}	1.60×10^{-3}	1.53×10^{-3}
4	$3d^94p$	$(5/2, 1/2)_2$	2832.29	3.22×10^{-4}	3.26×10^{-4}	3.38×10^{-4}	3.32×10^{-4}	7.15×10^{-5}	7.83×10^{-5}	8.11×10^{-5}	7.98×10^{-5}
5	$3d^94p$	$(5/2, 1/2)_3$	2834.05	6.06×10^{-4}	6.42×10^{-4}	6.44×10^{-4}	6.22×10^{-4}	4.78×10^{-4}	5.28×10^{-4}	5.44×10^{-4}	5.26×10^{-4}
6	$3d^94s$	$(3/2, 1/2)_1$	2879.56	1.55×10^{-4}	1.63×10^{-4}	1.63×10^{-4}	1.58×10^{-4}	3.16×10^{-5}	3.55×10^{-5}	3.61×10^{-5}	3.53×10^{-5}
7	$3d^94s$	$(3/2, 1/2)_2$	2881.35	6.68×10^{-4}	6.92×10^{-4}	7.10×10^{-4}	6.82×10^{-4}	7.87×10^{-4}	8.70×10^{-4}	8.84×10^{-4}	8.47×10^{-4}
8	$3d^94p$	$(3/2, 1/2)_2$	3024.38	2.58×10^{-4}	2.77×10^{-4}	2.66×10^{-4}	2.62×10^{-4}	5.18×10^{-5}	6.00×10^{-5}	5.79×10^{-5}	5.69×10^{-5}
9	$3d^94p$	$(3/2, 1/2)_1$	3029.25	1.64×10^{-3}	1.62×10^{-3}	1.59×10^{-3}	1.57×10^{-3}	3.66×10^{-3}	3.95×10^{-3}	4.01×10^{-3}	3.88×10^{-3}
10	$3d^94p$	$(5/2, 3/2)_4$	3163.40	3.97×10^{-4}	4.32×10^{-4}	4.19×10^{-4}	4.16×10^{-4}	8.82×10^{-5}	1.04×10^{-4}	1.00×10^{-4}	9.85×10^{-5}
11	$3d^94p$	$(5/2, 3/2)_2$	3165.38	2.69×10^{-4}	2.80×10^{-4}	2.89×10^{-4}	2.85×10^{-4}	5.76×10^{-5}	6.69×10^{-5}	6.48×10^{-5}	6.41×10^{-5}
12	$3d^94p$	$(5/2, 3/2)_1$	3166.95	1.44×10^{-3}	1.48×10^{-3}	1.49×10^{-3}	1.44×10^{-3}	3.69×10^{-3}	4.12×10^{-3}	4.37×10^{-3}	4.19×10^{-3}
13	$3d^94p$	$(5/2, 3/2)_3$	3170.16	3.09×10^{-4}	3.14×10^{-4}	3.29×10^{-4}	3.14×10^{-4}	2.42×10^{-4}	2.65×10^{-4}	2.74×10^{-4}	2.62×10^{-4}
14	$3d^94p$	$(3/2, 3/2)_0$	3350.70	9.03×10^{-5}	8.50×10^{-5}	9.24×10^{-5}	9.19×10^{-5}	2.13×10^{-5}	2.15×10^{-5}	2.44×10^{-5}	2.38×10^{-5}
15	$3d^94p$	$(3/2, 3/2)_1$	3356.16	2.32×10^{-4}	2.31×10^{-4}	2.36×10^{-4}	2.37×10^{-4}	1.64×10^{-4}	1.83×10^{-4}	1.99×10^{-4}	1.75×10^{-4}
16	$3d^94p$	$(3/2, 3/2)_3$	3357.36	4.10×10^{-4}	3.20×10^{-4}	4.38×10^{-4}	4.14×10^{-4}	3.15×10^{-4}	3.21×10^{-4}	3.59×10^{-4}	3.41×10^{-4}
17	$3d^94p$	$(3/2, 3/2)_2$	3360.12	1.74×10^{-4}	1.70×10^{-4}	1.79×10^{-4}	1.80×10^{-4}	3.41×10^{-5}	3.53×10^{-5}	3.78×10^{-5}	3.81×10^{-5}
18	$3d^94d$	$(5/2, 3/2)_1$	3365.31	6.08×10^{-4}	5.80×10^{-4}	6.46×10^{-4}	6.30×10^{-4}	1.24×10^{-4}	1.35×10^{-4}	1.47×10^{-4}	1.43×10^{-4}
19	$3d^94d$	$(5/2, 3/2)_4$	3373.08	6.86×10^{-4}	7.30×10^{-4}	7.26×10^{-4}	7.02×10^{-4}	2.97×10^{-4}	3.42×10^{-4}	3.39×10^{-4}	3.31×10^{-4}
20	$3d^94d$	$(5/2, 3/2)_2$	3374.42	8.16×10^{-4}	8.15×10^{-4}	8.57×10^{-4}	8.39×10^{-4}	5.91×10^{-4}	6.58×10^{-4}	6.72×10^{-4}	6.57×10^{-4}
21	$3d^94d$	$(5/2, 3/2)_3$	3378.05	4.28×10^{-4}	4.19×10^{-4}	4.47×10^{-4}	4.38×10^{-4}	6.53×10^{-5}	7.17×10^{-5}	7.45×10^{-5}	7.42×10^{-5}
22	$3p^54s$	$(3/2, 1/2)_2$	3406.20	2.16×10^{-4}	2.33×10^{-4}			4.40×10^{-5}	5.15×10^{-5}		

续表 1

序号	组态	能级	激发能 /eV	碰撞强度							
				$\epsilon_f = 400 \text{ eV}$				$\epsilon_f = 10000 \text{ eV}$			
				不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用	文献 5]	文献 22]	不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用	文献 5]	文献 22]
23	$3p^5 4s$	$(3/2, 1/2)_1$	3410.85	2.43×10^{-3}	2.41×10^{-3}			5.53×10^{-3}	6.15×10^{-3}		
24	$3d^9 4d$	$(5/2, 5/2)_1$	3437.38	5.05×10^{-4}	5.78×10^{-4}	5.30×10^{-4}	5.24×10^{-4}	1.03×10^{-4}	1.59×10^{-4}	1.15×10^{-4}	1.14×10^{-4}
25	$3d^9 4d$	$(5/2, 5/2)_2$	3439.98	9.10×10^{-4}	9.87×10^{-4}	9.48×10^{-4}	9.34×10^{-4}	1.59×10^{-4}	1.92×10^{-4}	1.79×10^{-4}	1.77×10^{-4}
26	$3d^9 4d$	$(5/2, 5/2)_3$	3445.10	5.99×10^{-4}	6.09×10^{-4}	6.27×10^{-4}	6.17×10^{-4}	1.05×10^{-4}	1.21×10^{-4}	1.18×10^{-4}	1.16×10^{-4}
27	$3d^9 4d$	$(5/2, 5/2)_2$	3446.50	1.37×10^{-3}	1.39×10^{-3}	1.45×10^{-3}	1.40×10^{-3}	1.73×10^{-3}	1.91×10^{-3}	1.96×10^{-3}	1.90×10^{-3}
28	$3d^9 4d$	$(5/2, 5/2)_4$	3447.73	4.55×10^{-4}	4.57×10^{-4}	4.88×10^{-4}	4.67×10^{-4}	1.41×10^{-4}	1.55×10^{-4}	1.61×10^{-4}	1.55×10^{-4}
29	$3d^9 4d$	$(5/2, 5/2)_6$	3478.59	7.82×10^{-3}	8.13×10^{-3}	7.97×10^{-3}	8.12×10^{-3}	7.99×10^{-3}	8.69×10^{-3}	8.58×10^{-3}	8.79×10^{-3}
30	$3p^5 4p$	$(3/2, 1/2)_1$	3550.01	1.96×10^{-4}	1.95×10^{-4}			4.36×10^{-5}	4.53×10^{-5}		
31	$3p^5 4p$	$(3/2, 1/2)_2$	3551.43	1.50×10^{-3}	1.55×10^{-3}			2.15×10^{-3}	2.35×10^{-3}		
32	$3d^9 4d$	$(3/2, 3/2)_3$	3564.12	5.28×10^{-4}	5.54×10^{-4}	5.40×10^{-4}	5.30×10^{-4}	9.59×10^{-5}	1.13×10^{-4}	1.06×10^{-4}	1.05×10^{-4}
33	$3d^9 4d$	$(3/2, 3/2)_1$	3565.26	3.33×10^{-4}	3.48×10^{-4}	3.30×10^{-4}	3.38×10^{-4}	6.51×10^{-5}	8.42×10^{-5}	6.95×10^{-5}	7.17×10^{-5}
34	$3d^9 4d$	$(3/2, 3/2)_2$	3572.80	4.89×10^{-4}	4.91×10^{-4}	4.86×10^{-4}	5.01×10^{-4}	4.97×10^{-4}	7.94×10^{-4}	5.18×10^{-4}	5.45×10^{-4}
35	$3d^9 4d$	$(3/2, 3/2)_6$	3615.89	1.85×10^{-2}	1.94×10^{-2}	1.88×10^{-2}	1.94×10^{-2}	1.85×10^{-2}	2.08×10^{-2}	2.04×10^{-2}	2.11×10^{-2}
36	$3d^9 4d$	$(3/2, 5/2)_1$	3629.31	5.13×10^{-4}	4.73×10^{-4}	5.37×10^{-4}	5.20×10^{-4}	1.05×10^{-4}	1.10×10^{-4}	1.22×10^{-4}	1.19×10^{-4}
37	$3d^9 4d$	$(3/2, 5/2)_4$	3634.07	6.42×10^{-4}	6.82×10^{-4}	6.58×10^{-4}	6.48×10^{-4}	2.40×10^{-4}	2.78×10^{-4}	2.80×10^{-4}	2.66×10^{-4}
38	$3d^9 4d$	$(3/2, 5/2)_2$	3636.27	6.95×10^{-4}	6.93×10^{-4}	7.25×10^{-4}	7.04×10^{-4}	4.63×10^{-4}	5.17×10^{-4}	5.30×10^{-4}	5.14×10^{-4}
39	$3d^9 4d$	$(3/2, 5/2)_3$	3638.77	4.27×10^{-4}	4.12×10^{-4}	4.42×10^{-4}	4.31×10^{-4}	6.56×10^{-5}	7.06×10^{-5}	7.50×10^{-5}	7.37×10^{-5}
40	$3d^9 4f$	$(5/2, 5/2)_6$	3644.28	4.37×10^{-4}	4.19×10^{-4}	4.70×10^{-4}	4.52×10^{-4}	8.38×10^{-5}	8.24×10^{-5}	9.57×10^{-5}	9.29×10^{-5}
41	$3d^9 4f$	$(5/2, 5/2)_1$	3649.94	1.00×10^{-3}	1.02×10^{-3}	1.09×10^{-3}	1.04×10^{-3}	1.98×10^{-4}	2.23×10^{-4}	2.34×10^{-4}	2.22×10^{-4}
42	$3d^9 4f$	$(5/2, 5/2)_3$	3655.75	7.01×10^{-4}	7.85×10^{-4}	7.42×10^{-4}	7.21×10^{-4}	2.74×10^{-4}	3.17×10^{-4}	3.23×10^{-4}	3.06×10^{-4}
43	$3d^9 4f$	$(5/2, 5/2)_2$	3656.95	8.50×10^{-4}	8.27×10^{-4}	8.90×10^{-4}	8.56×10^{-4}	1.26×10^{-4}	1.33×10^{-4}	1.43×10^{-4}	1.39×10^{-4}
44	$3d^9 4f$	$(5/2, 5/2)_3$	3661.49	9.49×10^{-4}	9.78×10^{-4}	1.00×10^{-3}	9.68×10^{-4}	4.50×10^{-4}	4.99×10^{-4}	5.24×10^{-4}	5.05×10^{-4}
45	$3d^9 4f$	$(5/2, 5/2)_4$	3662.73	5.37×10^{-4}	5.33×10^{-4}	5.49×10^{-4}	5.38×10^{-4}	6.30×10^{-5}	6.71×10^{-5}	6.99×10^{-5}	6.95×10^{-5}
46	$3d^9 4f$	$(5/2, 7/2)_6$	3674.81	1.15×10^{-3}	1.24×10^{-3}	1.19×10^{-3}	1.18×10^{-3}	1.69×10^{-4}	2.02×10^{-4}	1.91×10^{-4}	1.92×10^{-4}
47	$3d^9 4f$	$(5/2, 7/2)_2$	3675.99	9.94×10^{-4}	1.07×10^{-3}	1.05×10^{-3}	1.02×10^{-3}	1.55×10^{-4}	2.10×10^{-4}	1.79×10^{-4}	1.75×10^{-4}
48	$3d^9 4f$	$(5/2, 7/2)_4$	3682.55	8.64×10^{-4}	9.00×10^{-4}	9.05×10^{-4}	8.81×10^{-4}	1.23×10^{-4}	1.48×10^{-4}	1.40×10^{-4}	1.38×10^{-4}
49	$3d^9 4f$	$(5/2, 7/2)_3$	3684.81	4.33×10^{-4}	4.39×10^{-4}	4.55×10^{-4}	4.37×10^{-4}	1.04×10^{-4}	1.15×10^{-4}	1.22×10^{-4}	1.15×10^{-4}
50	$3d^9 4f$	$(5/2, 7/2)_3$	3685.21	1.57×10^{-3}	1.60×10^{-3}	1.70×10^{-3}	1.60×10^{-3}	1.76×10^{-3}	1.94×10^{-3}	2.06×10^{-3}	1.97×10^{-3}
51	$3d^9 4f$	$(5/2, 7/2)_1$	3711.39	3.86×10^{-2}	3.87×10^{-2}	4.03×10^{-2}	4.03×10^{-2}	6.14×10^{-2}	6.68×10^{-2}	7.43×10^{-2}	7.35×10^{-2}
52	$3d^9 4f$	$(3/2, 5/2)_4$	3847.10	7.31×10^{-4}	7.64×10^{-4}	7.34×10^{-4}	7.27×10^{-4}	1.11×10^{-4}	1.28×10^{-4}	1.18×10^{-4}	1.20×10^{-4}
53	$3d^9 4f$	$(3/2, 5/2)_2$	3850.10	7.34×10^{-4}	7.54×10^{-4}	7.58×10^{-4}	7.33×10^{-4}	1.14×10^{-4}	1.36×10^{-4}	1.26×10^{-4}	1.24×10^{-4}
54	$3d^9 4f$	$(3/2, 5/2)_3$	3857.23	7.86×10^{-4}	8.14×10^{-4}	8.70×10^{-4}	8.16×10^{-4}	8.52×10^{-4}	9.23×10^{-4}	9.79×10^{-4}	9.38×10^{-4}
55	$3d^9 4f$	$(3/2, 7/2)_2$	3865.65	1.18×10^{-3}	1.19×10^{-3}	1.23×10^{-3}	1.18×10^{-3}	2.05×10^{-4}	2.26×10^{-4}	2.30×10^{-4}	2.25×10^{-4}
56	$3d^9 4f$	$(3/2, 7/2)_3$	3870.28	5.82×10^{-4}	6.06×10^{-4}	6.18×10^{-4}	5.86×10^{-4}	2.26×10^{-4}	2.53×10^{-4}	2.67×10^{-4}	2.50×10^{-4}
57	$3d^9 4f$	$(3/2, 7/2)_3$	3874.44	9.88×10^{-4}	1.01×10^{-3}	1.06×10^{-3}	1.00×10^{-3}	6.19×10^{-4}	6.80×10^{-4}	7.25×10^{-4}	6.84×10^{-4}
58	$3d^9 4f$	$(3/2, 7/2)_4$	3876.40	5.27×10^{-4}	5.31×10^{-4}	5.41×10^{-4}	5.26×10^{-4}	6.50×10^{-5}	7.19×10^{-5}	7.24×10^{-5}	7.14×10^{-5}
59	$3p^5 4p$	$(3/2, 3/2)_3$	3880.90	3.36×10^{-4}	3.55×10^{-4}			7.59×10^{-5}	8.96×10^{-5}		

续表 1

序号	组态	能级	激发能 /eV	碰撞强度							
				$\epsilon_f = 400 \text{ eV}$				$\epsilon_f = 10000 \text{ eV}$			
				不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用	文献 5]	文献 22]	不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用	文献 5]	文献 22]
60	$3p^5 4p$	$(3/2, 3/2)_1$	3881.03	1.88×10^{-4}	2.10×10^{-4}			4.45×10^{-5}	5.94×10^{-5}		
61	$3d^9 4f$	$(3/2, 5/2)_1$	3883.14	5.46×10^{-2}	5.43×10^{-2}	5.60×10^{-2}	5.66×10^{-2}	8.78×10^{-2}	9.27×10^{-2}	1.04×10^{-1}	1.04×10^{-1}
62	$3p^5 4p$	$(3/2, 3/2)_2$	3887.76	6.17×10^{-4}	6.30×10^{-4}			9.15×10^{-4}	1.00×10^{-3}		
63	$3p^5 4p$	$(3/2, 3/2)_0$	3916.34	1.64×10^{-2}	1.66×10^{-2}			1.74×10^{-2}	1.75×10^{-2}		
64	$3p^5 4d$	$(3/2, 3/2)_0$	4083.95	9.98×10^{-5}	9.10×10^{-5}			2.26×10^{-5}	2.02×10^{-5}		
65	$3p^5 4d$	$(3/2, 3/2)_1$	4090.36	6.56×10^{-4}	6.30×10^{-4}			1.05×10^{-3}	1.03×10^{-3}		
66	$3p^5 4d$	$(3/2, 3/2)_3$	4091.59	8.15×10^{-4}	8.35×10^{-4}			8.50×10^{-4}	8.60×10^{-4}		
67	$3p^5 4d$	$(3/2, 3/2)_2$	4095.72	1.61×10^{-4}	1.51×10^{-4}			3.13×10^{-5}	2.93×10^{-5}		
68	$3p^5 4d$	$(3/2, 5/2)_4$	4158.74	4.16×10^{-4}	4.26×10^{-4}			8.37×10^{-5}	8.80×10^{-5}		
69	$3p^5 4d$	$(3/2, 5/2)_2$	4161.33	2.38×10^{-4}	2.34×10^{-4}			4.98×10^{-5}	5.19×10^{-5}		
70	$3p^5 4d$	$(3/2, 5/2)_1$	4161.88	4.71×10^{-3}	4.52×10^{-3}			1.14×10^{-2}	1.12×10^{-2}		
71	$3p^5 4d$	$(3/2, 5/2)_3$	4165.68	4.57×10^{-4}	4.55×10^{-4}			4.96×10^{-4}	4.98×10^{-4}		
72	$3p^5 4s$	$(1/2, 1/2)_0$	4343.06	3.63×10^{-5}	3.53×10^{-5}			8.70×10^{-6}	8.52×10^{-6}		
73	$3p^5 4s$	$(1/2, 1/2)_1$	4345.68	2.41×10^{-4}	2.55×10^{-4}			3.86×10^{-4}	4.03×10^{-4}		
74	$3p^5 4f$	$(3/2, 5/2)_1$	4365.54	4.97×10^{-4}	4.85×10^{-4}			1.02×10^{-4}	1.02×10^{-4}		
75	$3p^5 4f$	$(3/2, 5/2)_4$	4374.40	6.98×10^{-4}	7.33×10^{-4}			7.14×10^{-4}	7.44×10^{-4}		
76	$3p^5 4f$	$(3/2, 5/2)_2$	4374.54	6.24×10^{-4}	6.36×10^{-4}			2.28×10^{-4}	2.42×10^{-4}		
77	$3p^5 4f$	$(3/2, 5/2)_3$	4379.83	2.81×10^{-4}	2.77×10^{-4}			4.84×10^{-5}	4.85×10^{-5}		
78	$3p^5 4f$	$(3/2, 7/2)_5$	4392.16	7.76×10^{-4}	8.02×10^{-4}			1.58×10^{-4}	1.70×10^{-4}		
79	$3p^5 4f$	$(3/2, 7/2)_3$	4397.50	5.26×10^{-4}	5.43×10^{-4}			1.01×10^{-4}	1.12×10^{-4}		
80	$3p^5 4f$	$(3/2, 7/2)_4$	4403.07	3.67×10^{-4}	3.69×10^{-4}			4.05×10^{-4}	4.10×10^{-4}		
81	$3p^5 4f$	$(3/2, 7/2)_2$	4406.93	1.02×10^{-2}	1.02×10^{-2}			1.60×10^{-2}	1.61×10^{-2}		
82	$3p^5 4p$	$(1/2, 1/2)_1$	4487.77	1.50×10^{-4}	1.56×10^{-4}			3.72×10^{-5}	3.98×10^{-5}		
83	$3p^5 4p$	$(1/2, 1/2)_0$	4510.24	6.41×10^{-3}	6.48×10^{-3}			6.86×10^{-3}	6.93×10^{-3}		
84	$3s 4s$	$(1/2, 1/2)_1$	4688.67	1.56×10^{-4}	1.56×10^{-4}			4.11×10^{-5}	4.24×10^{-5}		
85	$3s 4s$	$(1/2, 1/2)_0$	4708.52	5.64×10^{-3}	5.71×10^{-3}			6.21×10^{-3}	6.26×10^{-3}		
86	$3p^5 4p$	$(1/2, 3/2)_2$	4822.01	3.17×10^{-4}	3.24×10^{-4}			3.65×10^{-4}	3.72×10^{-4}		
87	$3p^5 4p$	$(1/2, 3/2)_1$	4822.44	1.51×10^{-4}	1.44×10^{-4}			3.79×10^{-5}	3.52×10^{-5}		
88	$3s 4p$	$(1/2, 1/2)_0$	4836.03	3.39×10^{-5}	3.26×10^{-5}			7.99×10^{-6}	7.67×10^{-6}		
89	$3s 4p$	$(1/2, 1/2)_1$	4836.47	4.56×10^{-4}	4.43×10^{-4}			1.22×10^{-3}	1.19×10^{-3}		
90	$3p^5 4d$	$(1/2, 3/2)_2$	5029.57	1.70×10^{-4}	1.73×10^{-4}			3.97×10^{-5}	4.13×10^{-5}		
91	$3p^5 4d$	$(1/2, 3/2)_1$	5034.10	4.90×10^{-4}	4.69×10^{-4}			1.53×10^{-3}	1.48×10^{-3}		
92	$3p^5 4d$	$(1/2, 5/2)_2$	5096.03	2.14×10^{-4}	2.06×10^{-4}			5.69×10^{-5}	5.55×10^{-5}		
93	$3p^5 4d$	$(1/2, 5/2)_3$	5099.73	3.50×10^{-4}	3.59×10^{-4}			3.32×10^{-4}	3.38×10^{-4}		
94	$3s 4p$	$(1/2, 3/2)_2$	5170.32	1.17×10^{-4}	1.22×10^{-4}			2.67×10^{-5}	2.86×10^{-5}		
95	$3s 4p$	$(1/2, 3/2)_1$	5172.28	4.24×10^{-4}	4.53×10^{-4}			5.83×10^{-4}	6.01×10^{-4}		
96	$3p^5 4f$	$(1/2, 5/2)_3$	5312.81	2.97×10^{-4}	3.05×10^{-4}			6.63×10^{-5}	7.16×10^{-5}		

续表 1

序号	组态	能级	激发能 /eV	碰撞强度					
				$\epsilon_f = 400 \text{ eV}$				$\epsilon_f = 10000 \text{ eV}$	
				不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用	文献 5]	文献 22]	不考虑 Breit 相互作用	考虑 Breit 相互作用
97	$3p^5 4f$	$(1/2, 5/2)_2$	5319.33	3.81×10^{-3}	3.84×10^{-3}			5.87×10^{-3}	5.94×10^{-3}
98	$3p^5 4f$	$(1/2, 7/2)_3$	5333.60	5.16×10^{-4}	5.19×10^{-4}			1.06×10^{-4}	1.09×10^{-4}
99	$3p^5 4f$	$(1/2, 7/2)_4$	5336.51	4.14×10^{-4}	4.22×10^{-4}			3.78×10^{-4}	3.85×10^{-4}
100	$3s 4d$	$(1/2, 3/2)_1$	5376.99	9.34×10^{-5}	9.27×10^{-5}			2.09×10^{-5}	2.06×10^{-5}
101	$3s 4d$	$(1/2, 3/2)_2$	5379.40	2.91×10^{-4}	2.95×10^{-4}			3.94×10^{-4}	3.98×10^{-4}
102	$3s 4d$	$(1/2, 5/2)_3$	5446.54	1.98×10^{-4}	2.04×10^{-4}			4.69×10^{-5}	4.90×10^{-5}
103	$3s 4d$	$(1/2, 5/2)_2$	5447.77	6.60×10^{-4}	6.63×10^{-4}			1.09×10^{-3}	1.09×10^{-3}
104	$3s 4f$	$(1/2, 5/2)_2$	5659.08	2.77×10^{-4}	2.76×10^{-4}			6.35×10^{-5}	6.47×10^{-5}
105	$3s 4f$	$(1/2, 5/2)_3$	5661.83	8.44×10^{-4}	8.71×10^{-4}			8.78×10^{-4}	8.91×10^{-4}
106	$3s 4f$	$(1/2, 7/2)_4$	5680.50	4.95×10^{-4}	5.11×10^{-4}			1.09×10^{-4}	1.17×10^{-4}
107	$3s 4f$	$(1/2, 7/2)_3$	5685.94	1.68×10^{-3}	1.71×10^{-3}			2.28×10^{-3}	2.31×10^{-3}

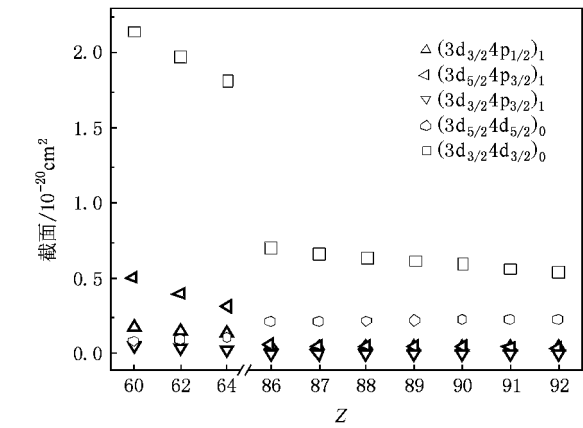


图 1 入射电子能量 $\epsilon_i = 4000 \text{ eV}$ 时,从基态到五个 X 射线激光关联能级的电子碰撞激发截面随原子序数 Z 的变化

X 射线激光的研究中,等离子体环境的影响非常重要,因此,实验研究更需要大量高精度的有效碰撞强度或速率系数的结果.图 2 以 Gd^{36+} 离子为例展示了从基态到五个激光能级 $(3d_{3/2}4p_{1/2})_1$ $(3d_{5/2}4p_{3/2})_1$ $(3d_{3/2}4p_{3/2})_1$ $(3d_{5/2}4d_{5/2})_0$ 和 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 的速率系数随电子温度的变化,图中纵坐标采用了对数坐标.从图 2 可以看出 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 激发态的速率系数要远远大于其他四个激发态的速率系数.对于三个 $4p$ 激发态,随着电子温度的升高,速率系数逐渐增大;而对于两个 $4d$ 激发态,随着电子温度的升高,速率系数首先增大,在大约 2600 eV 时,达到峰值,然后逐渐减小.所以,理论上获得 Gd^{36+} 离子最强 X 射线激光的电子温度应该控制在 2600 eV 附近.作

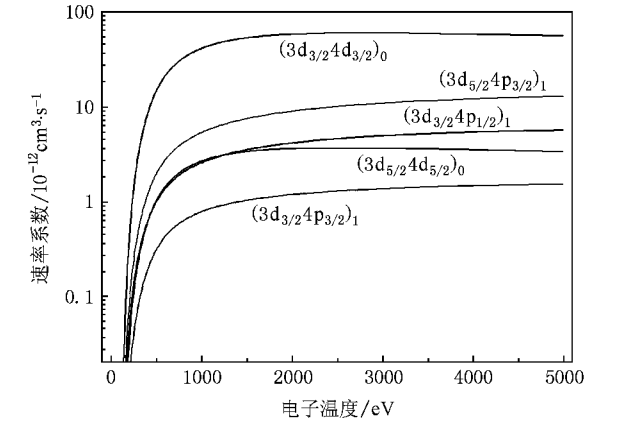


图 2 Gd^{36+} 离子从基态到五个 X 射线激光关联能级的电子碰撞激发速率系数

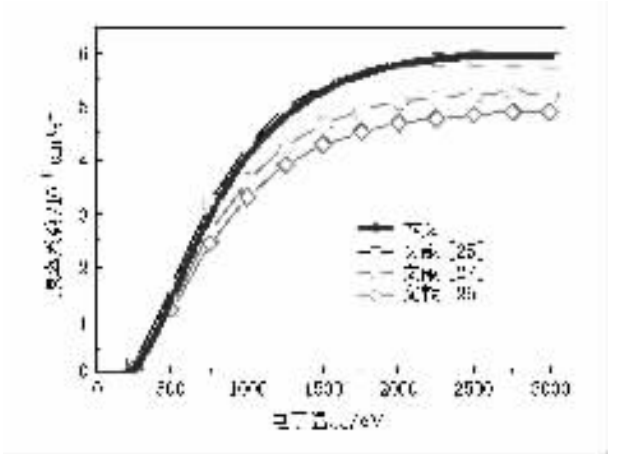


图 3 Gd^{36+} 离子基态到 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 激发态电子碰撞激发速率系数的比较

为比较,图 3 展示了目前计算所得 Gd^{36+} 离子从基态到 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 激发态的速率系数与以往 King 等人^[25]分别利用 Dirac Atomic R-matrix Code (DARC)^[11] 和 Cowan 程序^[26],以及 Daido 等人^[27]利用相对论平面波玻恩近似 (RPWB) 计算结果的比较.从图 3 中可以看出,目前计算与 DARC 程序的计算结果符合的非常好.其他理论由于其在处理高离化态离子时存在的缺陷,包括对相对论效应和其他物理效应的考虑不足,与 DARC 理论以及目前计算的结果相比,都有很大的偏差.

3.3. 强组态相互作用对碰撞激发截面的影响

对高离化态类镱 $Rn^{58+} - U^{64+}$ ($Z = 86-92$) 离子能级结构的研究表明,随等电子系列变化时,类镱离子在 $Z = 87$ 和 91 附近,具有相同总角动量和宇称 $J^p = 1^+$ 的三个能级,即 $(3d_{3/2}4d_{5/2})_1$ 和 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_1$ 分别与 $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ 发生能级交叉^[28].这种能级的交叉意味着强组态相互作用的存在以及原子态波函数的强烈混合.为了研究这种强组态相互作用对电子碰撞激发参数的影响,图 4 给出了在一定的入射电子能量 ($\epsilon_i = 4000$ eV) 下,高离化态类镱离子 ($Z = 86-92$) 从基态 $3d^{10}1S_0$ 到三个激发态 $(3d_{3/2}4d_{5/2})_1$ ($3d_{3/2}4d_{3/2})_1$ 和 $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ 的电子碰撞激发截面随原子序数 Z 的变化.可以看出,在 $Z = 87$ 附近,由于 $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ 和 $(3d_{3/2}4d_{5/2})_1$ 能级间强的组态相互作用, $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ 激发态的截面突然增大,在 $Z = 88$ 时达到最大;相反 $(3d_{3/2}4d_{5/2})_1$ 激发态的截面突然减小,在 $Z = 88$ 时达到最小.而在 $Z = 91$ 附近,相似的变化也发生在 $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ 和 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_1$ 激发态的截面之间.这说明,强的组态相互作用会强烈影响电子的碰撞激发截面.随着某一激发态截面的突然增大,总会有另一个关联激发态的截面突然减小,这种效应总是成对出现.另外,对不同入射电子能量下截面的大量计算结果表明,电子碰撞激发截面随 Z 的这种变化与入射电子无关,其完全是靶原子(离子)结构和性质的反映.

4. 结 论

本文利用基于 MCDF 方法基础上发展起来的全相对论扭曲波方法和相关的计算程序 REIE06,系统

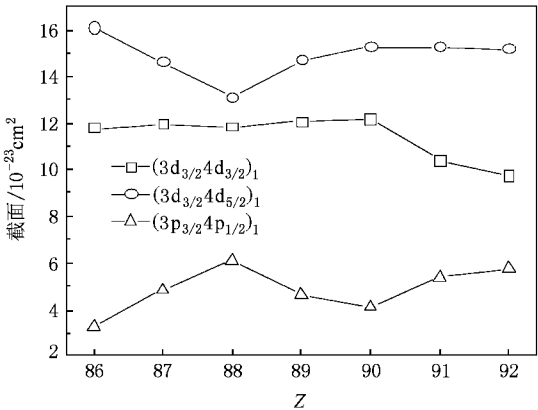


图 4 $\epsilon_i = 4000$ eV 时,从基态到 $(3d_{3/2}4d_{5/2})_1$ ($3d_{3/2}4d_{3/2})_1$ 和 $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ 激发态电子碰撞激发截面随原子序数 Z 的变化

计算了高离化态类镱 Gd^{36+} 以及 $Rn^{58+} - U^{64+}$ 离子从基态到 107 个激发态的电子碰撞激发强度、截面和速率系数等碰撞参数.通过对 Gd^{36+} 和 U^{64+} 离子在不同散射电子能量下碰撞激发强度与以往理论的比较,说明了目前方法和程序的正确性和可靠性.另外,本文研究了 Breit 相互作用对高 Z 高离化态离子碰撞强度的影响,分析了随等电子系列变化时,从基态到涉及 X 射线激光 $J = 0 \rightarrow 1$ 跃迁的五个激发态 $(3d_{3/2}4p_{1/2})_1$ ($3d_{3/2}4p_{3/2})_1$ ($3d_{3/2}4p_{3/2})_1$ ($3d_{5/2}4d_{5/2})_0$ 和 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 的电子碰撞激发截面随原子序数 Z 的变化,同时讨论了由于能级的交叉引起的强组态相互作用对 $(3d_{3/2}4d_{5/2})_1$ ($3d_{3/2}4d_{3/2})_1$ 和 $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ 激发态碰撞激发截面影响的一般规律.结果表明:

1. Breit 相互作用对碰撞强度、截面的影响随 Z 逐渐变大,在高离化态离子电子碰撞激发参数的精确计算中需要系统考虑.
2. 在高 Z 类镱离子 ($Z = 86-92$) 中,与 X 射线有关的 4d 激发态的截面普遍高于 4p 激发态的截面,其中从基态到 $(3d_{3/2}4d_{3/2})_0$ 激发态的截面最大,有利于短波长 X 射线激光的获得;高 Z 类镱离子 ($Z = 86-92$) 与中 Z 类镱 Nd^{32+} , Sm^{34+} 和 Gd^{36+} 离子相比,尽管高 Z 离子可以产生更短波长的 X 射线激光,但其激光的增益会减小.
3. 强的组态相互作用总是成对地影响涉及交叉的两个能级的电子碰撞激发截面,随着某一激发态截面的突然增大,总会有另一个关联激发态截面的突然减小,这种截面的突变与靶离子的结构和性质紧密联系,与入射电子无关.

- [1] Sampson D H 1986 *Phys. Rev. A* **34** 986
- [2] Bar-Shalom A 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1773
- [3] Sampson D H ,Zhang H L ,Mohanty A K ,1989 *Phys. Rev. A* **40** 604
- [4] Zhang H L ,Sampson D H 1990 *Phys. Rev. A* **42** 5378
- [5] Chen G X 1996 *Phys. Rev. A* **53** 3227
- [6] Zhang J 1995 *Physics* **24** 129 (in Chinese)[张 杰 1995 物理 **24** 129]
- [7] Zhong J Y ,Wang C ,Zhang J ,Lu X , Zhao G , Zeng J L , Gu M F , Wang S J 2004 *Phys. Rev. A* **70** 053803
- [8] Fontes C J ,Sampson D H ,Zhang H L 1993 *Phys. Rev. A* **47** 1009
- [9] Chen G X ,Pradhan A K 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 013202
- [10] Norrington P H ,Grant I P 1987 *J. Phys. B* **20** 4869
- [11] Ait-Tahar S ,Grant I P ,Norrington P H 1996 *Phys. Rev. A* **54** 3984
- [12] Bray I ,Stelbovics A T 1995 *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **35** 209
- [13] Stone P M ,Kim Y K ,Desclaux J P 2002 *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **107** 327
- [14] Qiu Y B ,Jia B L 1993 *Chinese Journal of Computation Physics* **1** 13 (in Chinese)[丘玉波、贾宝琳 1993 计算物理 **1** 13]
- [15] Hu W ,Fang D F ,Wang Y S ,Lu F Q , Tang J Y , Yang F J 1993 *Acta Phys. Sin.* **42** 1416 (in Chinese)[胡 畏、方渡飞、王炎森、陆福全、汤家镛、杨福家 1993 物理学报 **42** 1416]
- [16] Grant I P ,Mckenzie B J ,Norrington P H 1980 *Comp. Phys. Commun.* **21** 207
- [17] Parpia F A ,Fischer C F ,Grant I P 1996 *Comp. Phys. Commun.* **94** 249
- [18] Fritzsche S 2001 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Rev. B* **114** 1155
- [19] Jiang J ,Dong C Z ,Xie L Y 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 691
- [20] Dong C Z ,Fritzsche S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 012507
- [21] Ong W ,Russek A 1978 *Phys. Rev. A* **17** 120
- [22] Zhang H L ,Sampson D H ,Mohanty A K 1989 *Phys. Rev. A* **40** 616
- [23] Hagelstein P L 1986 *Phys. Rev. A* **34** 874
- [24] Daido H ,Kato Y ,Murai S ,Ninomiya S ,Kodama R , Yuan G , Oshikane Y ,Takagi M ,Takabe H 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1074
- [25] King R ,Pert G J ,Aggarwal K M ,Keenan F P , Rose S J 2004 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **37** 225
- [26] Cowan R 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (CA : University of California Press)
- [27] Daido H ,Ninomiya S ,Imani T ,Okaichi Y , Taragi M , Kodama R , Koike F , Nilsen J , Murai K 1997 *Int. J. Mod. Phys. B* **11** 945
- [28] Wan J J ,Xie L Y ,Dong C Z ,Jiang J , Yan J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 152 (in Chinese)[万建杰、颉录有、董晨钟、蒋 军、颜 君 2007 物理学报 **56** 152]

Fully relativistic distorted-wave calculations for electron impact excitation of highly charged Nickel-like ions^{*}

Xie Lu-You¹⁾ Zhang Zhi-Yuan¹⁾ Dong Chen-Zhong^{1)†} Jiang Jun¹⁾

¹⁾ College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China

²⁾ Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, China

(Received 31 March 2008 ; revised manuscript received 25 April 2008)

Abstract

A fully relativistic distorted-wave method and the corresponding procedure REIE06 have been developed recently to study the electron impact excitation processes of highly charged ions. In this study, we calculated the collision strengths, cross sections and rate coefficients for electron impact excitation of highly charged Nickel-like Gd^{36+} , Rn^{58+} — U^{64+} ($Z = 86$ — 92) ions from the ground state to 106 low-lying excited states. In the calculations, the relativistic effects, electron correlation effects, Breit interactions and high partial wave contributions are considered systematically. Based on the calculations, we studied the contribution of Breit interaction to collision strengths, the cross sections connected with the strongest $4d-4p$ ($J = 0$ — 1) X-ray laser transitions along the Ni-like sequence, and the effects of strong configuration interaction on cross sections from the ground state $3d^{10}1S_0$ to the $(3d_{3/2}4d_{5/2})_1$, $(3d_{3/2}4d_{3/2})_1$ and $(3p_{3/2}4p_{1/2})_1$ states. A comparison was made between the present results and previous theoretical calculations for collision strengths of Gd^{36+} and U^{64+} ions, and rate coefficients of Gd^{36+} ion, good agreement was obtained.

Keywords: electron impact excitation, relativistic distorted-wave method, highly charged Nickel-like ions

PACC: 3480D, 3120, 3130

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10434100, 10774122), the SFI/RIA China-Ireland Research Collaboration Fund (Grant No. CI-2004-07), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20070736001), and the Foundation of Northwest Normal University, China (Grant No. NWN-UKJXGC-03-21).

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