

类氦钨基态到 ($n = 3, 4$) 88 个能级的碰撞强度*

方泉玉 蔡 蔚 沈智军 李 萍 徐元光

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

提要 采用“快速”扭曲波方法和程序 MCDW(九), 计算了类氦钨基态到 88 个 ($n \leq 4$) 激发态能级的电子碰撞激发截面, 并与国外完全相对论理论数据进行了详细比较, 一般差别在 10% 左右, 表明作者发展与建立的一套方法和程序不仅实现了“快速”计算而且有相当高的精度。

关键词 碰撞激发, 扭曲波, 组态相互作用, 截面, 碰撞强度

1 引 言

电子与高荷电离子碰撞激发截面(或强度)对于 X 激光和激光核聚变研究是十分重要的。特别是在 X 激光碰撞机制研究中, 需要大量的碰撞参数, 其所以如此, 是因为在激光产生的高温等离子体中, 往往存在多种高荷电的不同 Z 离子。对于每种 Z 离子需要考虑基态—激发态和激发态—激发态之间的几千种跃迁过程的碰撞速率系数, 而为了确定碰撞速率, 需要知道几个碰撞能量下的激发截面。同时对于每个碰撞能量, 又必须对初态、末态自由电子的许多角动量值确定跃迁矩阵元。可见, 获得这些激发截面的工作量是非常巨大的。另一方面, 从实验角度看, 提供激发截面极端困难, 能提供个别的检验理论实验数据都将是如获至宝。现在公开发表的理论数据^[1~5]不少, 但是可供使用的参数不多。因此需要发展“快速”而“精确”的理论方法, 更快更好地提供碰撞参数。我们在国外一些作者^[4, 6~8]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。基本思想是:

(1) 采用带有分数占据数的大平均组态来决定 Hartree-Fock-Slater 势, 用此统一的平均势解径向薛定格(Schrödinger)方程, 得到单电子轨道波函数(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, 同时提高了计算速度。P. L. Hagelstein *et al.*, D. H. Sampson *et al.* 都采用大平均组态决定势的办法, 效果很好, 并且已经发表了他们计算的大量数据^[4, 8]。我们是通过修改 Cowan 的程序来实现用平均组态造势的思想。

(2) 对于径向 Slater 积分

$$R = \iint P_i(r') P_j(r') (r' < / r >^{l+1}) P_a(r) P_b(r) dr' dr$$

* 本文获国家基金(9189012)资助。

当初、末态束缚电子 i, j 和入射、散射电子 a, b 的状态都已确定(除了入射电子能量 $\varepsilon_a = \varepsilon_b + \Delta E$ 依赖于激发能 ΔE 之外, ε_b 是散射电子能量), Slater 积分是激发能的缓慢变化的函数, 因此可以通过计算三个激发能下的 Slater 积分, 然后内插到实际激发能下相应的积分值^[8,9]。该方法能大大提高批量计算的速度。这里 $r_<, r_>$ 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^[10,11], 即光学允许跃迁使用库仑—Bethe 近似, 光学禁戒跃迁使用下降等比级数近似。

(4) 与 Cowan 程序一样, 对高荷电的中 Z 离子, 在非相对论薛定格方程中加入相对论修正项^[12,13]。这等价于在完全相对论 Dirac 方程中作如下近似, 将相对论性分裂的二个子壳层 ($j = l \pm 1/2$) 的量子数 K 取为平均值 (-1) , 同时忽略小分量。这种经过相对论修正的径向波函数, 其精度有所提高。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)。

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。

2 基本理论

我们用 αJ_q 表示 (Z, N) 离子能级状态, J_q 是离子组态的总角动量, α 代表规定该状态的其它量子数。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。由离子与碰撞电子组成的系统波函数 $|(\alpha J_q, j)J\rangle$ 有类似于(1)式的展开

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

这里 $j = l \pm 1/2$, l 是碰撞电子的轨道角动量。离子与碰撞电子的角动量为 jj 耦合。 jj 耦合可以转换成 LS 耦合

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

t_{jj-LS} 是转换矩阵元。离子从下能级 αJ_q 激发到上能级 $\alpha' J'_q$ 的碰撞强度与截面分别为^[14]

$$\Omega_{\alpha\alpha'} = \frac{8}{k_a k_b} \sum_{l_a l_b j_a j_b J} [J] \left| \sum_{\beta\beta'} C_{\beta\alpha} C_{\beta'\alpha'} \sum_{LS} T_{jj-LS} \langle \beta\beta' \rangle \right|^2 \quad (4)$$

$$\sigma_{\alpha\alpha'} = \frac{\Omega_{\alpha\alpha'}}{k_a^2 [J_q]} \quad (5)$$

其中, $[J_q] \equiv 2J_q + 1$ 是统计权重, k_a^2, k_b^2 分别为入射和散射电子的动能 (Ry), l_a, l_b, j_a, j_b 分别为入射和散射电子的轨道角动量和总角动量, 这里径向连续波函数取振幅归一, 即

$$P_a(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(Kr + \delta_i)$$

δ_i 为相移因子。 T_{jj-LS} 为两个 t_{jj-LS} 转换矩阵元的乘积

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

为基函数跃迁矩阵元, 式中

$$V = \sum_{s>m}^{N+1} \frac{1}{|r_m - r_{N+1}|} \quad (6)$$

在激发过程中,单电子算符矩阵元由于波函数正交而为零,实际上只要计算双电子算符 $1/|r_m - r_n|$ 跃迁矩阵元。在推导 $\langle \beta\beta' \rangle$ 矩阵元公式中,我们用常规方法^[12],将角动量积分与径向 Slater 积分分离开,同时作因式分解^[8,9],把直接碰撞项与交换碰撞项的角动量积分的共同部分提出来,从而简化了计算公式。对于基态到激发态的跃迁,例如,初、末态离子波函数可以分别写为 $D|(L_q^i S_q^i, l_i) L_q S_q\rangle$, $|(L_q^j S_q^j, l_j) L_q S_q\rangle$, D 代表部分根源系数^[12], l_i, l_j 代表作用电子, $L_q^i S_q^i$ 表示离子芯部(除作用电子外)的状态。此时跃迁矩阵元为

$$\langle \beta\beta' \rangle = D \sum_i (-1)^{L_q^i + l_i + L} \begin{Bmatrix} L_q & l_a & L \\ l_b & L_q & t \end{Bmatrix} U_b(L_q^i l_i L_q l_j L_q) \left\{ \delta_{S_q^i S_q^j} \text{Rd}(t) + \left[\delta_{S_q^i S_q^j} + 6(-1)^{S_q^i + \frac{1}{2} + S} \begin{Bmatrix} S_q & \frac{1}{2} & S \\ \frac{1}{2} & S_q & 1 \end{Bmatrix} U_b(S_q^i \frac{1}{2} S_q 1 \frac{1}{2} S_q^j) \right] \text{Re}(t) \right\} \quad (7)$$

其中, $U_b(j_1 j_2 j X j_2' j_1') = (-1)^{j_1 + j_2 + j + X} [j j']^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ X & j' & j_2' \end{Bmatrix}$ 代表约化矩阵元去掉头一个角动量耦合的角因子。即

$$\langle (j_1 j_2) j \| C^{(X)} \| (j_1' j_2') j \rangle = U_b(j_1 j_2 j X j_2' j_1') \langle j_2 \| C^{(X)} \| j_2' \rangle \quad (8)$$

(7) 式物理意义是明显的。第一项 $\delta_{S_q^i S_q^j} \text{Rd}(t)$ 是直接碰撞项的贡献,第二、第三项是交换碰撞项的贡献,对于自旋守恒($S_q = S_q'$)跃迁, $\delta_{S_q^i S_q^j} = 1$,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, $\delta_{S_q^i S_q^j} = 0$ 只有交换碰撞的贡献,这里

$$\text{Rd}(t) = \langle l_i \| C^{(t)} \| l_j \rangle \langle l_a \| C^{(t)} \| l_b \rangle \text{Rd}(t) \quad (9)$$

$$\text{Re}(t) = -\frac{1}{2} [t] \sum_{\gamma} (-1)^{t+\gamma} \begin{Bmatrix} l_i & l_j & t \\ l_a & l_b & \gamma \end{Bmatrix} \langle l_i \| C^{(\gamma)} \| l_j \rangle \langle l_a \| C^{(\gamma)} \| l_b \rangle \text{Re}(\gamma) \quad (10)$$

$\text{Rd}(t)$, $\text{Re}(\gamma)$ 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(7)式复杂一些,其中不仅有初态部分根源系数,还有末态部分根源系数,同时包括更多的角动量耦合系数。

3 结 果

本文选用如下 15 个组态

$$1s^2 2s^2 2p^6, 1s^2 2s^2 2p^5 3s, 3p, 3d; 1s^2 2s 2p^6 3s, 3p, 3d;$$

$$1s^2 2s^2 2p^5 4s, 4p, 4d, 4f; 1s^2 2s^1 2p^6 4s, 4p, 4d, 4f;$$

形成 89 个精细结构能级。同时采用带有分数占据数的大平均组态

$$1s^{2.0} 2s^{1.8} 2p^{5.0} 3s^{0.13} 3p^{0.23} 3d^{0.24} 4s^{0.14} 4p^{0.24} 4d^{0.24} 4f^{0.2}$$

产生 HFS 自洽势。然后基于上述理论计算了类氡钼基态到 88 个激发态能级的碰撞强度。为了与国外完全相对论的理论值比较,与他们一样,我们计算了 6 个散射电子能量下的碰撞强度。这 6 个能量点分别是

$$E = 0.008, 0.04, 0.1, 0.21, 0.41, 0.75. \quad k_0^2 = E Z_{\text{eff}}^2, \quad Z_{\text{eff}} = Z - 7.5$$

其中,第一和第六两个能量点的碰撞强度彼此差别较大。因此我们在表 1 给出这两个能量点上, Mo^{32+} 激发到 88 个能级的碰撞强度 Ω 。第四,五列(c)是我们用 MCDW(九)计算的数据,第六,七列(d)为文献[4]中完全相对论扭曲波结果。从表中可以看出,一般差别在 10% 以内。例外的是基态激发到能级 31 的过程,彼此相差达到 20%,现分析如下,能级 31 是中间耦合态,它是由 $2s3p$ 形成的 1P 单态($s = 0$)和 3P 三重态($s = 1$)组成,其耦合系数为

β 状态	能级 31	能级 33
$2s3p\ ^3P_1$	0.85319	- 0.51626
$2s3p\ ^1P_1$	0.51469	0.85471

能级 33 也是中间耦合态。由于基态激发到三重态($s = 1$)是自旋禁戒跃迁, 激发到单态($s = 0$)是自旋允许跃迁, 这就导致(1 ~ 31)的碰撞强度比(1 ~ 33)小很多, 因而前者受混合影响比较大, 对于(1 ~ 31)的碰撞强度, (c) 比(d) 约小 20%, 对于(1 ~ 33)的碰撞强度, (c) 比(d) 约大 10%, 但是如果考虑基态激发到能级 31 和 33 的总碰撞强度, 我们的结果与文献[4] 的数值相差在 4% 以内。

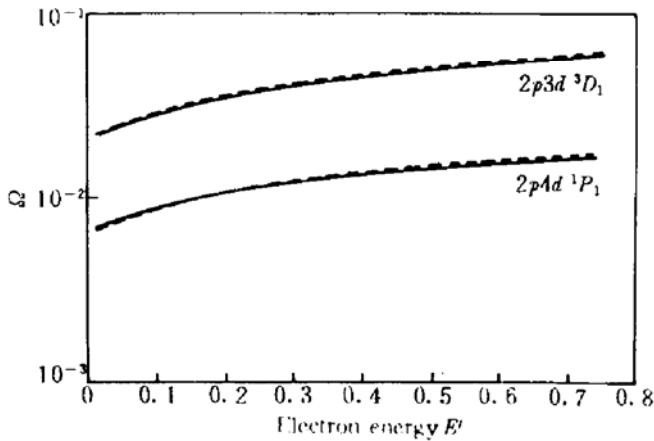


Fig. 1 Collision strengths of Mo^{32+} from the ground state to excited levels $2p^53d\ ^3D_1$, and $2p^54d\ ^1P_1$ as a function of scattered energy E' . Solid curves are our results, and the dotted curves are from Ref. [4]

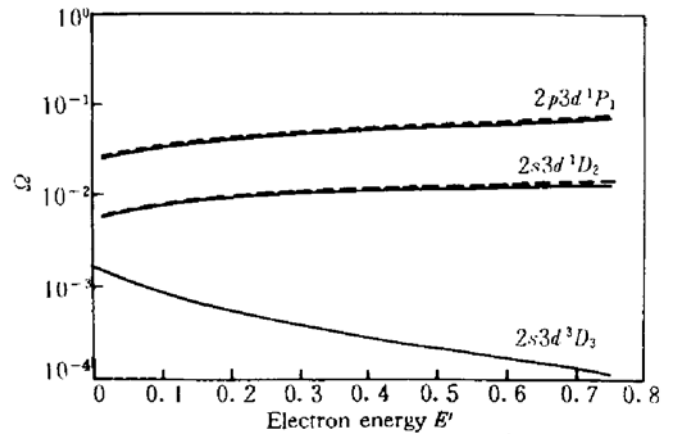


Fig. 2 Collision strengths of Mo^{32+} from the ground state to excited levels $2p^53d\ ^1P_1$, $2s3d\ ^1D_2$ and $2s3d\ ^3D_3$ as a function of scattered energy E' . Solid curves are our results, and the dotted curves are from Ref. [4]

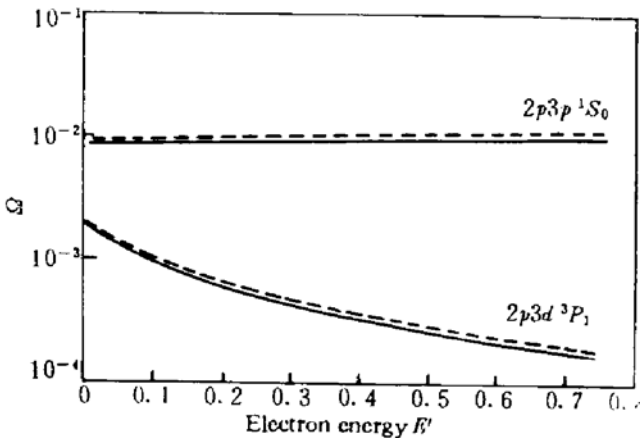


Fig. 3 Collision strengths of Mo^{32+} from the ground state to excited levels $2p^53p\ ^1S_0$, and $2p^53d\ ^3P_1$ as a function of scattered energy E' . Solid curves are our results, and the dotted curves are from Ref. [4]

为了比较更直观一些, 我们在图 1、图 2、图 3 中分别给出三种不同跃迁过程的碰撞强度曲线。其中图 3 的 $2p^6\ ^1S_0 - 2p^53p\ ^1S_0$ 强单极跃迁对于类氦离子 $3p$ 到 $3s$ 粒子数反转是很重要 的过程。图 1 电偶极矩阵元不为 0, 图 2 电偶极矩阵元为 0。还给出了两个强的光学允许跃迁 $2p^6\ ^1S_0 - 2p^53d\ ^3D_1$ (图 1), $2p^6\ ^1S_0 - 2p^53d\ ^1P_1$ (图 2) 的碰撞强度曲线, 一个弱的光学允许跃迁 $2p^6\ ^1S_0 - 2p^53d\ ^3P_1$ (图 3) 和一个只有交换碰撞项的跃迁 $2p^6\ ^1S_0 - 2s2p^63d\ ^3D_3$ (图 2) 的曲线图。这里弱光学允许跃迁 Ω 是随 E' 增加而下降的, 这种图像与典型的光学允许跃迁图像不同, 而与纯交换过程图像相似。这是因为该过程中, 对碰撞强度的贡献, 主要来自交换碰撞 ($\Delta s \neq 0$) 项。为了比较, 图中还给出了文献[4] 完全相对论理论值, 彼此数据符合很好,

相差在 10% 以内。

Table 1

Upper levels	Excited states (a)	Energies (b)	E'			
			0.008 ^(c)	0.75 ^(c)	0.008 ^(d)	0.75 ^(d)
2	$2p3s\ ^3P_2$	174.790	0.488E-3	0.518E-4	0.525E-3	0.543E-4
3	$2p3s\ ^1P_1$	175.070	0.552E-3	0.335E-2	0.582E-3	0.358E-2
4	$2p3p\ ^3S_1$	179.530	0.918E-3	0.886E-4	0.949E-3	0.912E-4
5	$2p3p\ ^3D_2$	179.750	0.121E-2	0.122E-2	0.131E-2	0.141E-2
6	$2p3p\ ^3D_3$	181.620	0.144E-2	0.114E-3	0.149E-2	0.116E-3
7	$2p3p\ ^1P_1$	181.620	0.750E-3	0.671E-4	0.781E-3	0.685E-4
8	$2p3p\ ^3P_2$	182.030	0.101E-2	0.121E-2	0.102E-2	0.124E-2
9	$2p3s\ ^3P_0$	182.960	0.990E-4	0.103E-4	0.102E-3	0.109E-4
10	$2p3s\ ^3P_1$	183.100	0.528E-3	0.248E-2	0.495E-3	0.220E-2
11	$2p3p\ ^3P_0$	183.680	0.646E-2	0.746E-2	0.674E-2	0.827E-2
12	$2p3d\ ^3P_0$	187.320	0.679E-3	0.455E-4	0.718E-3	0.486E-4
13	$2p3d\ ^3P_1$	187.590	0.174E-2	0.167E-3	0.184E-2	0.189E-3
14	$2p3p\ ^3D_1$	187.820	0.587E-3	0.456E-4	0.615E-3	0.497E-4
15	$2p3d\ ^3F_3$	187.910	0.161E-2	0.117E-2	0.168E-2	0.124E-2
16	$2p3d\ ^3D_2$	188.030	0.160E-2	0.886E-4	0.169E-2	0.935E-4
17	$2p3d\ ^3F_4$	188.160	0.229E-2	0.125E-3	0.236E-2	0.127E-3
18	$2p3d\ ^1D_2$	188.380	0.144E-2	0.763E-4	0.145E-2	0.754E-4
19	$2p3d\ ^3D_3$	188.720	0.113E-2	0.926E-3	0.116E-2	0.993E-3
20	$2p3p\ ^1S_0$	189.530	0.858E-2	0.101E-1	0.921E-2	0.114E-1
21	$2p3d\ ^1P_1$	189.820	0.251E-1	0.701E-1	0.253E-1	0.740E-1
22	$2p3p\ ^3P_1$	189.840	0.728E-3	0.637E-4	0.755E-3	0.682E-4
23	$2p3p\ ^1D_2$	190.000	0.119E-2	0.129E-2	0.114E-2	0.116E-2
24	$2p3d\ ^3F_2$	196.020	0.113E-2	0.589E-4	0.114E-2	0.600E-4
25	$2p3d\ ^3P_2$	196.480	0.182E-2	0.108E-3	0.177E-2	0.105E-4
26	$2p3d\ ^1F_3$	196.650	0.145E-2	0.112E-2	0.141E-2	0.108E-2
27	$2p3d\ ^3D_1$	197.110	0.215E-1	0.616E-1	0.210E-1	0.622E-1
28	$2s3s\ ^3S_1$	199.560	0.338E-3	0.282E-4	0.358E-3	0.300E-4
29	$2s3s\ ^1S_0$	200.490	0.541E-2	0.688E-2	0.582E-2	0.779E-2
30	$2s3p\ ^3P_0$	204.380	0.895E-4	0.863E-5	0.971E-4	0.934E-5
31	$2s3p\ ^3P_1$	204.490	0.452E-3	0.196E-2	0.556E-3	0.249E-2
32	$2s3p\ ^3P_2$	206.420	0.439E-3	0.438E-4	0.453E-3	0.453E-4
33	$2s3p\ ^1P_1$	206.660	0.114E-2	0.709E-2	0.101E-2	0.684E-2
34	$2s3d\ ^3D_1$	212.370	0.628E-3	0.495E-4	0.647E-3	0.510E-4
35	$2s3d\ ^3D_2$	212.500	0.132E-2	0.868E-3	0.133E-2	0.849E-3
36	$2s3d\ ^3D_3$	212.840	0.146E-2	0.115E-3	0.149E-2	0.115E-3
37	$2s3d\ ^1D_2$	213.540	0.569E-2	0.136E-1	0.569E-2	0.142E-1
38	$2p4s\ ^3P_2$	237.920	0.168E-3	0.180E-4	0.176E-3	0.183E-4
39	$2p4s\ ^1P_1$	238.020	0.103E-3	0.445E-3	0.103E-3	0.465E-3
40	$2p4p\ ^3S_1$	239.890	0.281E-3	0.268E-4	0.282E-3	0.268E-4
41	$2p4p\ ^3D_2$	239.960	0.352E-3	0.241E-3	0.370E-3	0.265E-3
42	$2p4p\ ^3D_3$	240.720	0.516E-3	0.411E-4	0.523E-3	0.409E-4
43	$2p4p\ ^1P_1$	240.740	0.247E-3	0.221E-4	0.253E-3	0.222E-4
44	$2p4p\ ^3P_2$	240.870	0.284E-3	0.230E-3	0.286E-3	0.234E-3
45	$2p4p\ ^1S_0$	241.510	0.227E-2	0.271E-2	0.239E-2	0.304E-2
46	$2p4d\ ^3P_0$	242.890	0.230E-3	0.165E-4	0.234E-3	0.169E-4
47	$2p4d\ ^3P_1$	242.990	0.575E-3	0.488E-4	0.580E-3	0.500E-4
48	$2p4d\ ^3F_3$	243.090	0.466E-3	0.226E-3	0.472E-3	0.231E-3
49	$2p4d\ ^3D_2$	243.140	0.496E-3	0.274E-4	0.498E-3	0.273E-4
50	$2p4d\ ^3F_4$	243.220	0.807E-3	0.479E-4	0.804E-3	0.468E-4
51	$2p4d\ ^1D_2$	243.290	0.547E-3	0.317E-4	0.544E-3	0.312E-4

Upper levels	Excited states	Energies	E'			
			(a)	(b)	0.008 ^(c)	0.75 ^(c)
52	2p4d ³ D ₃	243.410	0.347E-3	0.165E-3	0.345E-3	0.171E-3
53	2p4d ¹ P ₁	243.840	0.661E-2	0.173E-1	0.643E-2	0.176E-1
54	2p4f ³ D ₁	244.470	0.140E-3	0.514E-5	0.145E-3	0.541E-5
55	2p4f ³ G ₄	244.510	0.144E-3	0.101E-3	0.149E-3	0.106E-3
56	2p4f ³ D ₂	244.530	0.198E-3	0.518E-4	0.205E-3	0.574E-4
57	2p4f ³ G ₅	244.580	0.201E-3	0.733E-5	0.205E-3	0.735E-5
58	2p4f ³ F ₃	244.590	0.110E-3	0.278E-5	0.114E-3	0.290E-5
59	2p4f ¹ D ₂	244.630	0.503E-3	0.171E-2	0.494E-3	0.178E-2
60	2p4f ¹ F ₃	244.650	0.164E-3	0.498E-5	0.166E-3	0.499E-5
61	2p4f ³ F ₄	244.680	0.106E-3	0.402E-4	0.106E-3	0.421E-4
62	2p4s ³ P ₀	246.120	0.335E-4	0.367E-5	0.336E-4	0.379E-5
63	2p4s ³ P ₁	246.180	0.108E-3	0.142E-3	0.116E-3	0.130E-3
64	2p4p ³ D ₁	248.110	0.210E-3	0.166E-4	0.214E-3	0.177E-4
65	2p4p ³ P ₀	248.600	0.146E-2	0.174E-2	0.152E-2	0.191E-2
66	2p4p ³ P ₁	248.950	0.245E-3	0.219E-4	0.251E-3	0.231E-4
67	2p4p ¹ D ₂	248.990	0.346E-3	0.246E-3	0.337E-3	0.225E-3
68	2p4d ³ F ₂	251.270	0.412E-3	0.231E-4	0.402E-3	0.230E-4
69	2p4d ³ P ₂	251.470	0.671E-3	0.431E-4	0.638E-3	0.411E-4
70	2p4d ¹ F ₃	251.520	0.434E-3	0.203E-3	0.417E-3	0.198E-3
71	2p4d ³ D ₁	251.630	0.396E-2	0.101E-1	0.372E-2	0.992E-2
72	2p4f ³ G ₃	252.740	0.112E-3	0.374E-5	0.107E-3	0.357E-5
73	2p4f ³ F ₂	252.780	0.305E-3	0.864E-3	0.271E-3	0.787E-3
74	2p4f ³ D ₃	252.840	0.203E-3	0.699E-5	0.190E-3	0.647E-5
75	2p4f ¹ G ₄	252.840	0.129E-3	0.701E-4	0.119E-3	0.637E-4
76	2s4s ³ S ₁	262.460	0.141E-3	0.119E-4	0.143E-3	0.124E-4
77	2s4s ¹ S ₀	262.780	0.102E-2	0.134E-2	0.108E-2	0.150E-2
78	2s4p ³ P ₀	264.460	0.367E-4	0.337E-5	0.395E-4	0.362E-5
79	2s4p ³ P ₁	264.500	0.203E-3	0.706E-3	0.228E-3	0.798E-3
80	2s4p ³ P ₂	265.300	0.182E-3	0.169E-4	0.184E-3	0.172E-4
81	2s4p ¹ P ₁	265.380	0.370E-3	0.189E-2	0.331E-3	0.183E-2
82	2s4d ³ D ₁	267.570	0.194E-3	0.173E-4	0.192E-3	0.173E-4
83	2s4d ³ D ₂	267.620	0.385E-3	0.233E-3	0.380E-3	0.236E-3
84	2s4d ³ D ₃	267.770	0.453E-3	0.404E-4	0.447E-3	0.394E-4
85	2s4d ¹ D ₂	267.990	0.105E-2	0.244E-2	0.102E-2	0.249E-2
86	2s4f ³ F ₂	269.000	0.112E-3	0.497E-5	0.112E-3	0.504E-5
87	2s4f ³ F ₃	269.010	0.181E-3	0.169E-3	0.179E-3	0.178E-3
88	2s4f ³ F ₄	269.080	0.201E-3	0.896E-5	0.199E-3	0.877E-5
89	2s4f ¹ F ₃	269.110	0.236E-3	0.517E-3	0.227E-3	0.524E-3

Notes:

- (a) The abbreviations $2pnl$ have been used for configurations $1s^22s^22p^5nl$ in which a hole in a subshell is replaced with a single electron in the subshell and filled subshells are omitted;
- (b) Energy of the ground level is regard as zero, in unit of Ry ;
- (c) Scattered electron energy is $k_0^2 = E' Z_{eff}^2 [Ry]$, $Z_{eff} = Z - 7.5$, this column labeled (c) is our results for collision strengths;
- (d) The column labeled (d) is results of Ref. [4] using fully relativistic distorted wave method.

参 考 文 献

- 1 U. Feldman, A. K. Bhatia, S. Suckewer. Short wavelength laser calculations for electron pumping in neon-like krypton (KrXXVII). *J. Appl. Phys.*, 1983, 54(5): 2188~2197

- 2 A. K. Bhatia, U. Feldman, J. F. Seely. Atomic data and spectral line intensities for the neon isoelectronic sequence (SiX through KrXXVII). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1985, **32**(3) : 435~469
- 3 J. B. Mann. Excitation collision strengths for iron ions calculated with a distorted wave method. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1983, **29**(3) : 407~452
- 4 Honglin Zhang, D. H. Sampson. Relativistic distorted wave collision strengths for excitation to the 88 $n = 3$ and $n = 4$ levels in all 71 neon-like ions with $22 \leq Z \leq 92$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1989, **43**(1) : 1~69
- 5 P. L. Hagelstein, R. K. Jung. Relativistic distorted wave calculations of electron collision cross sections and rate coefficients for NE-like ions. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1987, **37**(1) : 121~188
- 6 A. Burgess, D. G. Hummer, J. A. Tully. Electron impact excitation of positive ions. *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, 1970, **A266** : 225~279
- 7 A. Burgess, J. A. Tully. On the bethe approximation. *J. Phys. B*, 1978, **11**(24) : 4271~4282
- 8 D. H. Sampson, H. L. Zhang, A. K. Mohantg *et al.*. A Dirac-Fock-Slater approach to atomic structure of highly charged ions. *Phys. Rev. A*, 1989, **40**(2) : 604~615
Honglin Zhang, D. H. Sampson, A. K. Mohanty. Fully relativistic and quasirelativistic distorted wave methods for calculating collision strengths for highly charged ions. *Phys. Rev. A*, 1989, **40**(2) : 616~632
- 9 A. Bar-Shalom, M. Klapisch, J. Oreg. Electron collision excitations in complex spectra of ionized heavy atoms. *Phys Rev. A*, 1988, **38**(4) : 1773~1784
- 10 方泉玉, 蔡蔚, 李萍等. 高分波碰撞强度的研究. *计算物理*, 1992, **9**(4) : 615~618
- 11 A. Burgess. Coulomb integrals; Tables and sum rules. *J. Phys. B*, 1974, **7**(12) : 364
- 12 R. D. Cowan. *The Theory of Atomic Structure and Spetra*. Univ. of California Press, Berkley, 1981. 162, 201, 378
- 13 方泉玉, 沈智军, 蔡蔚等. 电子与类锂离子组态能级之间的碰撞激发强度. *强激光与粒子束*, 1994, **8**(4) : 607~614
- 14 方泉玉, 李萍, 蔡蔚等. 玻恩近似下电子与离子碰撞的多组态计算. *强激光与粒子束*, 1992, **4**(2) : 186~200

Distorted Wave Calculation of Electron Impact Excitation Cross Sections of Mo^{32+}

Fang Quanyu Cai Wei Shen Zhijun Li Ping Xu Yuanguang
(*Institute of Applied Physics and Computation Mathematics, Beijing 100088*)

Abstract A "rapid" distorted wave method and our program MCDW (9) are used to calculate collision strengths of Mo^{32+} for the passible transitions from the ground state to excited levels. The results have been carefully compared with other full relativistic distorted-wave ones that have been published in the literature. The discrepancies are generally within 10%, indicating that this procedure and program are not only rapid but also accurate.

Key words impact excitation, distorted wave, configuration interaction, cross sections, collision strengths