arXiv:2302.12892v2 [astro-ph.SR] 6 Mar 2023

Ca IV 的碰撞激发和光激发，包括强烈的 3.2 μm 发射线

Sultana Nahar[1*]和 Bilal Shafique[2†]

[1*]天文学系，俄亥俄州立大学，美国俄亥俄州哥伦布市西 18 街 140 号，邮编 43210。[2]物理系，阿扎德查谟和克什米尔大学，巴基斯坦克什米尔穆扎法拉巴德，邮编 13100。

*通讯作者。电子邮箱：nahar.1@osu.edu；共同作者：bilalshafiquekhawaja@ajku.edu.pk；
†这些作者对本研究的贡献相同。

摘要

我们首次采用相对论布赖特-泡利R矩阵方法，对 Ca IV（Ca IV $+ e \rightarrow$ Ca IV* $+ e' \rightarrow$ Ca IV $+ h\nu + e'$）的电子碰撞激发特性进行了详细研究，并使用了一个包含属于 n=2,3,4 复合组态的 54 个精细结构能级的大型密耦合波函数展开。预计詹姆斯·韦布空间望远镜将观测到钙的红外（IR）谱线。本研究预测，Ca IV 中 $3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3p^5\ ^2P^o_{1/2}$ 的电子碰撞激发会产生一条强烈的 3.2 μm 红外发射线。该跃迁的电子碰撞激发碰撞强度（碰撞强度）表现出大量共振，且背景增强，使有效碰撞强度（Υ）在约 10^4 K 时达到 2.2，并在约 3×10^5 K 时升至 9.66。本研究结果包含 54 个能级之间全部 1431 个激发跃迁的碰撞强度，以及少量可能值得关注的跃迁的 Υ。我们发现，碰撞强度在低能区存在大量共振；采用包含 54 个能级的波函数后，共振和分波均已收敛。在高能区，共振区之外，禁戒跃迁的碰撞强度会下降；振子强度（f值）较低的电偶极允许跃迁的碰撞强度几乎保持恒定或缓慢下降；而 f值较高的跃迁则呈贝特-库仑行为，随 ln(E) 增长，最终趋近于平台。Ca IV 的波函数通过使用原子结构程序优化 13 个组态而得出：$3s^23p^5$, $3s3p^6$,$3s^23p^43d$, $3s^23p^44s$, $3s^23p^44p$, $3s^23p^44d$, $3s^23p^44f$, $3s^23p^45s$,$3s3p^53d$, $3s3p^54s$, $3s3p^54p$, $3p^63d$, $3s3p^43d^2$，每个组态的核心组态均为 $1s^22s^22p^6$；该程序

SUPERSTRUCTURE。这些组态产生了 387 个精细结构能级。我们报告了这些能级之间共 93296 个电偶极（E1）、电四极跃迁（E2）、电八极跃迁（E3）、磁偶极跃迁（M1）和四极跃迁（M2）的跃迁参数——振子强度、线强度（S）和 A 值。文中还给出了这些能级的寿命。

关键词：碰撞激发、光激发、Ca IV 的 3.2 微米谱线

1 引言

钙是最丰富的生物成因元素之一，它在超新星（SN）爆发过程中产生。冷星中可以观测到 Ca I 和 Ca II 谱线。超新星中通常可以探测到 H 和 K 线以及 Ca II 禁线（例如[1]）。这些谱线可用于确定天体中的元素丰度。Asplund 等人 [2] 测得太阳相对于氢的钙丰度（以对数丰度表示）为 log[e(Ca)] = 6。34±0.04，其中 log[e(Ca])=12+ log[N(Ca)/N(H)], H 定义为 log H = 12.00；N(Ca) 和 N(H) 分别是 Ca 和 H 元素的数密度。富钙超新星，例如位于距离地球约 5500 万光年的恒星形成旋涡星系梅西耶 100 中的 SN 2019ehk，最初由 Shepherd 发现 [3]，随后 Jacobson-Galan 等人进行了分析 [4], ，近期引起了广泛关注。J acobson-Galan [4] 发现，这颗富钙超新星属于 CaST 类。Feuchtgruber 等人在 NGC 7027 星云中观测到了红外（IR） Ca IV 谱线 [5]。3.2 μ 微米谱线在三颗沃尔夫–拉叶星中被观测到，Ignance 等人利用它测定了丰度和风速 [6]。此外，在 NGC 2707 和 NGC 6302 星云中观测到了两种钙离子 Ca V 和 Ca VII 的发射线[7], ，而在白矮星的高温环境中观测到了 Ca II 谱线 [8]。

本文研究了 Ca IV 中产生谱线的两种原子过程：电子碰撞激发（EIE）和光激发。EIE 是近乎真空空间或有无辐射源的天体物理等离子体中最常见的原子过程之一。运动中的电子与离子相互作用，传递部分能量并促使离子跃迁至激发态。随后，靶离子通过发射光子退激发（例如， [9]）

$$X^{+z} + e \rightarrow X^{+z*} + e' \rightarrow X^{+z} + h\nu + e' \tag{1}$$

其中， X^{+z} 是电荷为 z的靶离子。发射光子能否形成可观测谱线，取决于等离子体的辐射传输和密度。入射电子还可以通过将靶离子激发到更高能级 E^{**}, 同时自身附着于轨道 νl 而形成准束缚态；这种现象在自然界中十分常见，并与一个双激发的

自电离里德伯态

$$E_x\nu l = E^{**}(X^{+z}\nu l) = E_x - z^2/\nu^2 \tag{2}$$

随后脱离并成为自由电子。这一中间态会在碰撞散射中引入共振。 E_x 是离子的激发能， νl 分别是散射电子的有效量子数和角动量。本研究采用密耦合（CC）波函数展开，自动产生自电离共振。

另一种过程——光激发/退激发——会在离子吸收或发射光子时形成谱线

$$X^{+z} + h\nu \leftrightarrow X^{+z*} \tag{3}$$

当存在辐射源时，这一过程最为常见，例如恒星照耀等离子体。

在 Ca 的低电离阶段中，Ca IV 是研究最少的离子。文献中尚未发现关于其电子碰撞激发的研究。本文工作的重点是 Ca IV 的电子碰撞激发。

关于能量和跃迁的既往研究，Sugar 和 Corliss[10] 汇编了可在美国国家标准与技术研究院网站上查到的 Ca IV 实验测得能级 [11]。Naqvi 报道了 Ca IV 的辐射跃迁速率 [12], Varsavsky [13], Fawcett 和 Gabriel [14], Huang等人[16], Wilson等人。 [17], Gabriel 等人 [15] 识别了观测到的紫外跃迁所产生的若干谱线。随着詹姆斯·韦布空间望远镜（JWST）在红外区域开展高分辨率观测，探测到 Ca IV 谱线的可能性显著增加。本文工作报告了 Ca IV 多个能级的碰撞激发和光激发，包括碰撞强度（Ω）以及麦克斯韦平均碰撞强度（即有效碰撞强度）（ϒ），以及辐射跃迁的参数 f-、 $S-$ 和 $A-$ 值。

2 理论近似

下面简要概述电子碰撞激发和辐射光激发的理论背景，供读者参考。更多详情可参见 Pradhan 和 Nahar [9]。我们采用 Iron Project（IP， [18, 19]）开发的相对论 Breit-Pauli R矩阵（BPRM）方法，计算了 Ca IV 的电子碰撞激发（EIE）碰撞强度。我们采用密耦合（CC）近似下的波函数展开，其中靶中的激发能级包括 n=2、3、4，并据此获得了碰撞强度。我们使用原子结构程序 SUPERSTRUCTURE（SS， [20, 21]）中实现的相对论 Breit-Pauli近似，计算了一组广泛跃迁的辐射跃迁参数。

尽管碰撞和光激发采用了两种不同的方法，但相关计算彼此关联。BPRM 计算以靶离子（例如 Ca IV）的波函数展开为起点，该展开由程序 SUPERSTRUCTURE（SS）生成。我们先概述碰撞激发，随后介绍光激发或辐射跃迁。

2.1 用于电子碰撞激发的 Breit-Pauli R矩阵（BPRM）计算

Iron Project 采用的 BPRM 哈密顿量 [18, 19] 以原子里德伯单位表示为

$$H_{N+1}^{\rm BP} = \sum_{i=1}^{N+1}\left\{-\nabla_i^2 - \frac{2Z}{r_i}\right\} + \sum_{j>i}^{N+1}\frac{2}{r_{ij}} + H_{N+1}^{\rm mass} + H_{N+1}^{\rm Dar} + H_{N+1}^{\rm so}. \quad (4)$$

其中，前三项属于非相对论哈密顿量，后三项分别是单体相对论修正项，即质量项、达尔文项和自旋-轨道相互作用项。BPRM 代码包含了上述所有项，以及部分双体 Breit 相互作用修正项（例如 [9]）。一个里德伯能量单位（Ry）等于半个哈特里，因此各项中会出现系数 2。

BPRM 计算以通过 SS 生成的靶离子波函数为起点，并在密耦合（CC）近似下计算由靶离子和相互作用电子构成的总原子系统的波函数。在 CC 近似下，处于状态 $SL\pi J$ 的 (e+离子) 波函数，其中 S 为总自旋，L 为轨道角动量，J 为总角动量，表示为

$$\Psi_E(e+ion) = A\sum_{i}^{n}\chi_i(ion)\theta_i + \sum_j c_j\Phi_j(e+ion) \quad (5)$$

在第一项中，$\chi_i(ion)$ 是靶离子的波函数展开，θ_i 是相互作用电子在通道 $S_tL_t\pi_tJ_tk_i^2l(SL\pi J)$ 中的波函数展开，其中 $S_tL_t\pi_tJ_t$ 是与能量为 k_i^2、轨道角动量为 l 的入射电子相互作用的靶离子态。求和表示靶离子的基态和各种激发态。A 是反对称化算符。在第二项中，$\Phi_j(e+ion)$ 表示（靶+电子）波函数，基本上是从第一项中分离出来的部分，用于显示相互作用电子的正交条件和短程相互作用。包含靶离子激发的闭合耦合波函数展开能够自然地产生共振。靶离子的束缚态与入射电子连续态波函数在跃迁矩阵中的干涉引入了共振。将带有 Breit-Pauli 哈密顿量的 CC 展开代入薛定谔方程后，可得到一组耦合方程组。采用 R矩阵方法求解这组方程，从而得到（e+离子）系统的能量和波函数。

靶离子通过碰撞从状态 i 跃迁至状态k 的散射矩阵 $\mathrm{S}_{SL\pi J}(S_iL_iJ_il - S_kL_kJ_kl')$，其中 $SL\pi J$ 为（电子+离子）态，

l 以及 l' 分别为自由电子的入射分波和散射分波，它由入射波的反应矩阵（例如 [9, 23–25]）导出。电子碰撞激发（EIE）的碰撞强度 Ω 为，

$$\Omega(S_iL_iJ_i - S_kL_kJ_k) = \frac{1}{2}\sum_{SL\pi J}\sum_{l,l'}(2J+1)|r\mathbf{S}_{SL\pi J}(S_iL_iJ_il - S_kL_kJ_kl')|^2 \quad (6)$$

Ω揭示了碰撞中共振的详细特征。等离子体模型使用随温度变化的量——有效碰撞强度 $\Upsilon(T)$，该量通过对温度为 T_e 时电子的麦克斯韦分布函数上的 Ω 进行平均而得到，表示为

$$\Upsilon_{ij}(T_e) = \int_0^\infty \Omega_{ij}(E)\exp(-E/kT_e)d(E/kT_e), \quad (7)$$

其中，k 为玻尔兹曼常数，E 为激发后入射电子的能量，即散射电子的能量。激发速率系数（$q_{ij}(T_e)$）与有效碰撞强度 Υ_{ij} 的关系为

$$q_{ij}(T_e) = \frac{8.63\times10^{-6}}{g_iT_e^{1/2}}e^{-E_{ij}/kT_e}\Upsilon_{ij}(T_e)cm^3/s, \quad (8)$$

其中，g_i 为初始能级的统计权重，T 的单位为 K，E_{ij} 为以里德伯能量单位表示的跃迁能量，且 (1/kT = 157885/T)。

碰撞强度的高能背景会根据激发类型呈现某些普遍特征。Ω的背景是共振特征底部的平滑曲线。对于禁戒跃迁，Ω会随能量升高而减小至接近零。对于电偶极允许跃迁，采用库仑波函数的玻恩近似时，Ω呈现高能极限行为，可由库仑-贝特近似表示

$$\Omega_{ij}(E) = \frac{4g_if_{ij}}{E_{ij}}ln\frac{E}{E_{ij}}, \quad (9)$$

其中，f_{ij} 是电偶极允许跃迁的振子强度，E 是入射电子能量。在高能极限下，

$$\Omega_{ij}(E) \sim_{E\to\infty} d_{ij}ln(E) \quad (10)$$

其中，d_{ij} 与振子强度成正比。对数函数会随着电子能量的增加而增大，但当自变量的值很高时，函数的上升趋势会放缓。因此，当 d较小时，Ω乘以一个较小的数值，可能不会发生变化。当 d较大时，Ω会增大，但最终趋于平台。

2.2 辐射跃迁的原子结构计算 s

使用程序 SUPERSTRUCTURE 通过原子结构计算获得辐射跃迁参数的理论细节，例如可参见 [9, 21]。哈密顿量包括相对论质量修正项、达尔文修正项、自旋-轨道相互作用修正项、完整的二体 Breit 相互作用以及一些额外的二体项。程序 SS 中实现的相互作用电子与离子实势由 Thomas-Fermi-Amaldi-Dirac 势表示。该程序采用组态相互作用波函数展开，对于对称性 $J\pi$ 可表示为

$$\Psi(J\pi) = \sum_{i=1}^{N} a_i \psi[C_i(J\pi)] \tag{11}$$

其中， a_is 是组态 C_i, $\psi[C_i(J\pi)]$ 的波函数振幅或混合系数，该组态具有对称性 $J\pi$；求和遍及所有能够产生对称性为 $J\pi$ 的能级的 N组态。该波函数将产生 N 个哈密顿量矩阵本征值，每个本征值对应一个具有该对称性的能级的能量。能级能量的准确度可能取决于展开的规模以及混合系数数值的确定（例如 [9]。）

例如，电偶极允许跃迁（E1）的跃迁矩阵元为 $< \Psi_B||\mathbf{D}||\Psi_{B'} >$，其中 Ψ_B 和 $\Psi_{B'}$ 分别是初态和末态的束缚态波函数；$\mathbf{D} = \sum_i \mathbf{r}_i$ 是电偶极算符，其中求和遍及所有电子。线强度 S 由跃迁矩阵的模平方得到，

$$\mathbf{S} = |\left\langle \Psi_\mathbf{f}| \sum_{\mathbf{j=1}}^{\mathbf{N+1}} \mathbf{r_j} |\Psi_\mathbf{i}\right\rangle|^\mathbf{2} \tag{12}$$

其中 Ψ_i 和 Ψ_f 是初始和末态波函数。跃迁参数、振子强度（f_{ij}）和辐射衰变率（A）可由线强度计算得出：

$$f_{ij} = \frac{E_{ji}}{3g_i}\mathbf{S}, \quad A_{ji}(sec^{-1}) = \left[0.8032 \times 10^{10} \frac{E_{ji}^3}{3g_j}\right] \mathbf{S} \tag{13}$$

电四极跃迁（E2）、磁偶极跃迁（M1）、电八极跃迁（E3）和磁四极跃迁（M2）的跃迁概率可由各自的线强度计算得出（例如 [9, 21]）。

激发能级的寿命可由所有向较低能级跃迁的概率之和的倒数得到，

$$\tau_i(s) = 1/[\sum_j A_{ji}(s^{-1})] \tag{14}$$

以原子时间单位 $\tau_0 = 2.4191 \times 10^{-17}$s 表示时，跃迁概率或辐射衰变率可表示为 $A_{ji}(s^{-1}) = A_{ji}(a.u.)/\tau_0$。

3 计算

R 矩阵计算以靶波函数为输入。这些波函数由原子结构计算得到，主要使用 SUPERSTRUCTURE（SS）程序 [20, 21]。Ca IV 波函数、能量和相关辐射跃迁参数，是使用 SS 对该离子的 13 个组态进行优化后获得的，$3s^23p^5$，$3s3p^6$，$3s^23p^43d$，$3s^23p^44s$，$3s^23p^44p$，$3s^23p^44d$，$3s^23p^44f$，$3s^23p^45s$，$3s3p^53d$，$3s3p^54s$，$3s3p^54p$，$3p^63d$，$3s3p^43d^2$，每个组态均具有相同的离子实组态 $1s^22s^22p^6$ 。优化后的托马斯-费米轨道缩放参数依次为：1.26865（1s）、1.0395（2s）、1.04288（2p）、1.1（3s）、1.1（3p）、1.1（3d）、1.083（4s）、1.079（4p）、1.031（4d）、1.1（4f）和1.1（5s）。该组组态提供了387个精细结构能级，其中54个用于本研究的碰撞激发，因此也用于 Ca IV 的波函数展开。从大量能级中选取一组靶或离子实离子的能级，是 R 矩阵计算的标准做法。碰撞强度的计算取决于波函数展开的规模，在俄亥俄超级计算中心的高性能计算机上耗用了数百个 CPU 小时。

采用优化的组态集合以产生大量能级，目的是确保组态相互作用的贡献纳入各能级的波函数中，从而为密耦合波函数展开提供一组从基态开始、精度更高的能级。在计算中纳入所有能级（本例中为387个）将需要大量计算时间，预计会使计算难以承受；这种情况十分常见，因此实际中并不可行。R矩阵计算所考虑的激发能级集合通常取决于预期要揭示的物理现象，主要是共振特征。由于共振预计在超过54个能级后便已收敛，因此不预期从更高能级中发现新的物理现象；更高能级对应的共振将不再强烈，而是逐渐减弱并趋于背景。这也正是我们在结果部分展示的发现。

表1列出了纳入波函数展开的Ca IV的54个精细结构能级，并将SS计算得到的能量与美国国家标准与技术研究院（NIST）（www.nist.gov）列出的实验值进行比较。比较结果表明，本次计算的能量通常与观测值相差仅几个百分点。能级能量的精度取决于波函数展开通过给定组态集合之间的相互作用，在多大程度上准确表示了该能级。为了获得更精确的电子碰撞激发碰撞强度中的共振位置，我们在BPRM计算中用可用的观测能量替换了计算能量。

表1 Ca IV 的54个精细结构能级的当前计算能量与 [10]汇编表中所列能量（Sugar 和 Corliss [11]

K	组态	Term	$E_{present}$ (Ry)	E_{NIST} (Ry)	%差异
1	$3s^2 3p^5$	$^2P^o_{3/2}$	0	0	0.0
2	$3s^2 3p^5$	$^2P^o_{1/2}$	0.0302	0.0284	5.9
3	$3s3p^6$	$^2S_{1/2}$	1.3031	1.3891	6.2
4	$3s^2 3p^4 3d$	$^4D_{7/2}$	1.8197	1.8362	0.9
5	$3s^2 3p^4 3d$	$^4D_{5/2}$	1.8218	1.8385	0.9
6	$3s^2 3p^4 3d$	$^4D_{3/2}$	1.8243	1.8410	0.9
7	$3s^2 3p^4 3d$	$^4D_{1/2}$	1.8263	1.8431	0.9
8	$3s^2 3p^4 3d$	$^4F_{9/2}$	1.9901	1.9865	0.2
9	$3s^2 3p^4 3d$	$^4F_{7/2}$	1.9999	1.9964	0.2
10	$3s^2 3p^4 3d$	$^2P_{3/2}$	2.0047。	1.9965	0.4
11	$3s^2 3p^4 3d$	$^2P_{1/2}$	2.0070	2.0036	0.2
12	$3s^2 3p^4 3d$	$^4F_{5/2}$	2.0115	2.0083	0.2
13	$3s^2 3p^4 3d$	$^4F_{3/2}$	2.0225。	2.0149	0.4
14	$3s^2 3p^4 3d$	$^4P_{5/2}$	2.0705。	2.0473	0.2
15	$3s^2 3p^4 3d$	$^4P_{3/2}$	2.0761	2.0536	1.1
16	$3s^2 3p^4 3d$	$^2D_{3/2}$	2.0817	2.0732	0.4
17	$3s^2 3p^4 3d$	$^4P_{1/2}$	2.0840	2.0616	1.0
18	$3s^2 3p^4 3d$	$^2D_{5/2}$	2.0970	2.0890	0.4
19	$3s^2 3p^4 3d$	$^2F_{7/2}$	2.1076	2.1074	0.02
20	$3s^2 3p^4 3d$	$^2F_{5/2}$	2.1310	2.1297	0.06
21	$3s^2 3p^4 3d$	$^2G_{7/2}$	2.1369	2.1573	0.95
22	$3s^2 3p^4 3d$	$^2G_{9/2}$	2.1382	2.1571	0.88
23	$3s^2 3p^4 3d$	$^2F_{7/2}$	2.2990	2.3051	0.26
24	$3s^2 3p^4 3d$	$^2F_{5/2}$	2.3046	2.3109	0.27
25	$3s^2 3p^4 3d$	$^2D_{5/2}$	2.4602	2.4937	1.36
26	$3s^2 3p^4 3d$	$^2D_{3/2}$	2.4653	2.4993	1.34
27	$3s^2 3p^4 3d$	$^2S_{1/2}$	2.6559	2.6979	1.8
28	$3s^2 3p^4 4s$	$^4P_{5/2}$	2.6688	2.7714	3.7
29	$3s^2 3p^4 4s$	$^4P_{1/2}$	2.6701	2.7972	4.5
30	$3s^2 3p^4 4s$	$^2P_{3/2}$	2.6780	2.7974	4.24
31	$3s^2 3p^4 4s$	$^4P_{3/2}$	2.6818	2.7857	3.6
32	$3s^2 3p^4 4s$	$^2P_{1/2}$	2.6895	2.8098	4.3
33	$3s^2 3p^4 3d$	$^2D_{5/2}$	2.7449	2.8566	4.2
34	$3s^2 3p^4 3d$	$^2P_{3/2}$	2.7495	2.8976	5.2
35	$3s^2 3p^4 3d$	$^2P_{1/2}$	2.7666	2.9135	4.9
36	$3s^2 3p^4 4s$	$^2D_{3/2}$	2.7689	2.8794	3.8
37	$3s^2 3p^4 4s$	$^2D_{5/2}$	2.8479	2.9941	4.7
38	$3s^2 3p^4 3d$	$^2D_{3/2}$	2.8491	2.9961	4.7
39	$3s^2 3p^4 4p$	$^4P^o_{5/2}$	3.0145	3.1268	3.8
40	$3s^2 3p^4 4p$	$^4P^o_{3/2}$	3.0179	3.1318	3.5
41	$3s^2 3p^4 4p$	$^4P^o_{1/2}$	3.0251	3.1386	3.5
42	$3s^2 3p^4 4p$	$^4D^o_{7/2}$	3.0539	3.1829	4.1
43	$3s^2 3p^4 4p$	$^4D^o_{5/2}$	3.0610	3.1913	4.0
44	$3s^2 3p^4 4p$	$^4D^o_{3/2}$	3.0706	3.1996	4.0
45	$3s^2 3p^4 4p$	$^2P^o_{1/2}$	3.0729	3.2128	4.3
46	$3s^2 3p^4 4p$	$^4D^o_{1/2}$	3.0751	3.2039	4.0
47	$3s^2 3p^4 4p$	$^2D^o_{5/2}$	3.0824	3.2185	4.0
48	$3s^2 3p^4 4s$	$^2S_{1/2}$	3.0828	3.2573	5.4
49	$3s^2 3p^4 4p$	$^2D^o_{3/2}$	3.0888	3.2376	4.0
50	$3s^2 3p^4 4p$	$^2P^o_{3/2}$	3.1017	3.2209	3.7
51	$3s^2 3p^4 4p$	$^4S^o_{3/2}$	3.1217	3.2577	4.0
52	$3s^2 3p^4 4p$	$^2S^o_{1/2}$	3.1249	3.2598	4.0
53	$3s^2 3p^4 4p$	$^2F^o_{7/2}$	3.2091	3.3629	4.5
54	$3s^2 3p^4 4p$	$^2F^o_{5/2}$	3.2133	3.3591	4.5

确保分波数目和（e+离子）对称性对碰撞强度 Ω 的贡献收敛非常重要。我们通过改变不同的分波组 l （最高达到 22）以及（e-离子）对称性 J（偶宇称和奇宇称的最高值达到 ≤ 22），多次计算了 Ω。我们发现：i）当 $l = 20$ 和 $J\pi =$ 的最高值分别为 11 时，Ω 的背景已收敛；ii）采用比这些更大的 l 和 $J\pi$ 会导致计算不稳定，使碰撞强度在各种电子能量处出现 NaN （非数值）。

在R矩阵计算中，Ω 值出现“NaN”是一个已知问题。当计算过程中遇到非常小的数值时，就会出现这种情况。通常会从 Ω 值集合中删除 NaN 点。不过，我们尝试通过外推或插值相邻的 Ω 点，来获得使用较大的 l 和 J 值时 NaN 对应能量处 Ω 的近似值。平滑背景可以外推，但无法在 Ω 中重现共振，如图1中的蓝色曲线（经过外推）和红色曲线（未经外推）所示；它们代表该离子的同一种激发。蓝色曲线的共振峰低于红色曲线；蓝色曲线上有许多 NaN 点，并且通过插值将 NaN 替换为实数。

图1还展示了对若干组 l J $^2P^o_{3/2} - ^2P^o_{1/2}$ $^2P^o_{1/2} - ^2S_{1/2}$ 的最高 l 取值以及在粗能量网格上计算的 a) 和 b) 激发过程的碰撞强度 Ω 收敛性测试。红色曲线对应使用 $l = 0$ - 20 和 $J\pi = 0$- 11，蓝色曲线对应使用 $l = 0$ - 22 和 $J\pi = 0$ - 21，洋红色曲线对应使用 $l = 0$ - 11 和 $J\pi = 0$ - 10。洋红色曲线中的 Ω（$l = 0$- 11 和 $J\pi$=0- 10）明显低于其他曲线，表明 12 个分波的贡献尚未收敛。蓝色和红色曲线的背景大致相同，表明分波贡献已收敛。因此，计算碰撞强度 Ω 时采用了红色曲线的参数设置，即 $l = 0$ - 20 和 $J\pi = 0$- 11。最终的 Ω 值是在细能量网格上获得的。我们采用非常精细的 $\Delta E < 10^{-6}$ 里德伯能量单位能量网格，以分辨近阈值共振。

上述讨论涉及具有显著影响的分波。除此之外，还加入了补充项以提供一些额外贡献。作为补充项，我们使用R矩阵代码中的STGF的ipert选项，将高阶多极势对Ω的贡献纳入考虑=1 。另一种补充贡献来自指定分波以外的更高分波，可在STGF中通过ipert选项=2进行选择。R矩阵代码STGF中采用的近似很可能基于Burgess和Tully [22] 对更高分波的处理。然而，计算更高分波的贡献不仅耗时更长，而且在大多数情况下都无法完成，因为除少数激发和某些能量外，计算都会因数值问题而中止。我们在可能的情况下计算了更高分波的贡献以进行检验，发现其对Ω值的提升微乎其微，不会影响平均碰撞强度 ϒ。这一问题通过以下方式得到弥补：

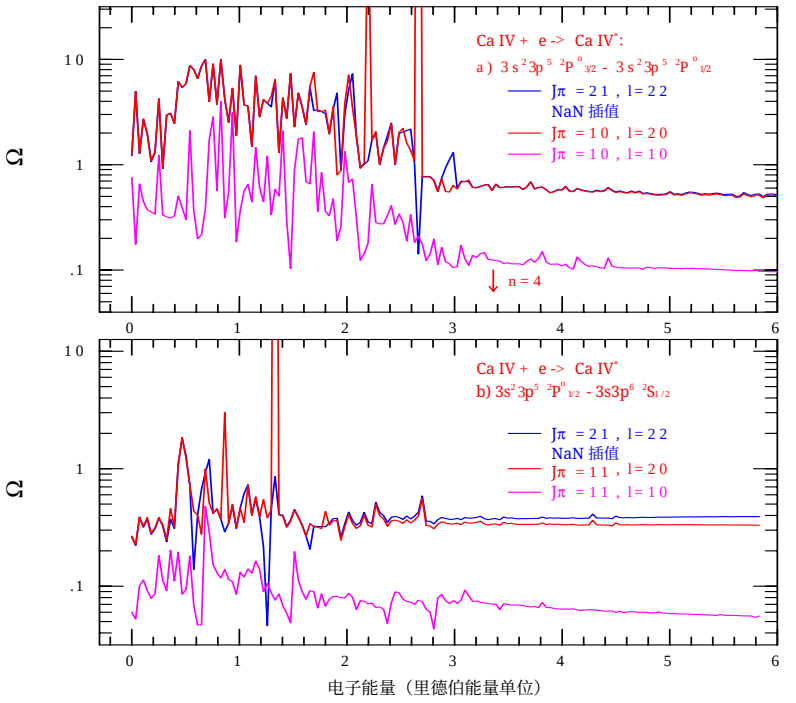


图 1 展示了不同 l 和 J 值下分波贡献对 Ω 的收敛情况。横轴表示激发后散射电子的能量，其起始能量为零。红色曲线表示最佳收敛条件。

与本研究的做法相同，即在不采用近似的情况下纳入更多分波。

程序 ”ecs-omg.f” [26] 用于计算 ϒ在不同温度下的有效碰撞强度，见式（7）。计算时，Ω 在散射电子能量从零到较高值的范围内积分。高能极限选取为 Ω 已降至接近零或达到平台的能量值，且 ϒ 的指数因子已接近零。BPRM 代码计算出的最高电子能量与 ϒ 积分的最高能量极限之间的 Ω 值，采用式（10）库仑-贝特近似的对数行为求得。

$f-$ 和 $A-$的偶极允许光激发（E1）辐射数据已使用 PRCSS 程序（例如[?]）结合实验能量重新处理。由此可获得观测波长下的跃迁参数。重新处理时，跃迁能量取自实验能级能量，并按照公式 13 将其与 SUPERSTRUCTURE 程序计算得到的谱线强度相乘。对于没有观测值或测量值的能级，则采用计算能量。

4 结果与讨论

本文给出了电子碰撞激发（e ＋ Ca IV →Ca IV* ＋ e’ → Ca IV ＋ hν ＋ e’）和光激发（Ca IV ＋ hν ↔ Ca IV*）的原子参数。据文献检索显示，碰撞激发的结果首次报道。下文先介绍这些结果，再介绍光激发的结果。

4.1 Ca IV 的碰撞激发

我们通过示例讨论碰撞激发的特征。靶的首次激发通常尤其值得关注，因为它通过电子碰撞激发发生的概率很高，而且通常能量较低的发射光子可以在不被吸收的情况下传播很长时间。如果相应的发射线很强，就能在低密度等离子体中轻易探测到，并可用于识别离子和诊断环境。Ca IV 的首次激发 $3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3p^5\ ^2P^o_{1/2}$，位于基态组态内，尤为重要，因为该发射线的波长为 3.207 μm，完全处于詹姆斯·韦布空间望远镜的高分辨率红外波长探测范围 0.6 - 28.3 μm 内，可用于诊断和丰度测定（例如 [6]）。

图 2 上图展示了靶离子 Ca IV 的首次激发 Ω($^2P^o_{3/2} -^2\ P^o_{1/2}$) 随激发后散射电子能量变化的碰撞强度。电子能量是相对于激发阈值而言的，因此从零开始。我们注意到，碰撞激发的 Ω 相当强，因为在第一激发能级 $^2P^o_{1/2}$ 与下一个能级 $^2S_{1/2}$ 之间的能量区域内（箭头所指处）显示出广泛的共振，并且背景增强；超过该区域后，直到 $^2D_{3/2}$ 能级（54 能级波函数展开中最后一个电偶极允许跃迁之前的能级），碰撞强度仍然很强。再往后，除一个跃迁外，$^2D_{3/2}$ 处的跃迁均为禁戒跃迁，共振也变得较弱。在这一能量范围内，总共有 29 个电偶极允许能级。靶离子的每一次激发都对应一个里德伯系列的共振。通常，与电偶极允许激发相对应的共振是可见的，而其他共振则受到抑制。属于非常高能级的共振会变得越来越弱。这种减弱趋势表明，共振贡献正趋于收敛于碰撞参数。

图 2 下方面板展示了 Ω[($^2P^o_{3/2} -^2P^o_{1/2}$) 的有效碰撞强度（ϒ）。其在低能量处从较低值开始，并在 10^4 K 处形成一个肩峰。随后，它相对快速地上升，在约 3×10^5K 处达到 9.66 的高峰值。该峰值表明 Ca IV 中存在一条可探测到的强跃迁谱线。谱线强度取决于等离子体环境。

我们展示 Ca IV 中禁戒跃迁的示例。图 3 展示了 Ca IV 中两种禁戒激发的碰撞强度，a)

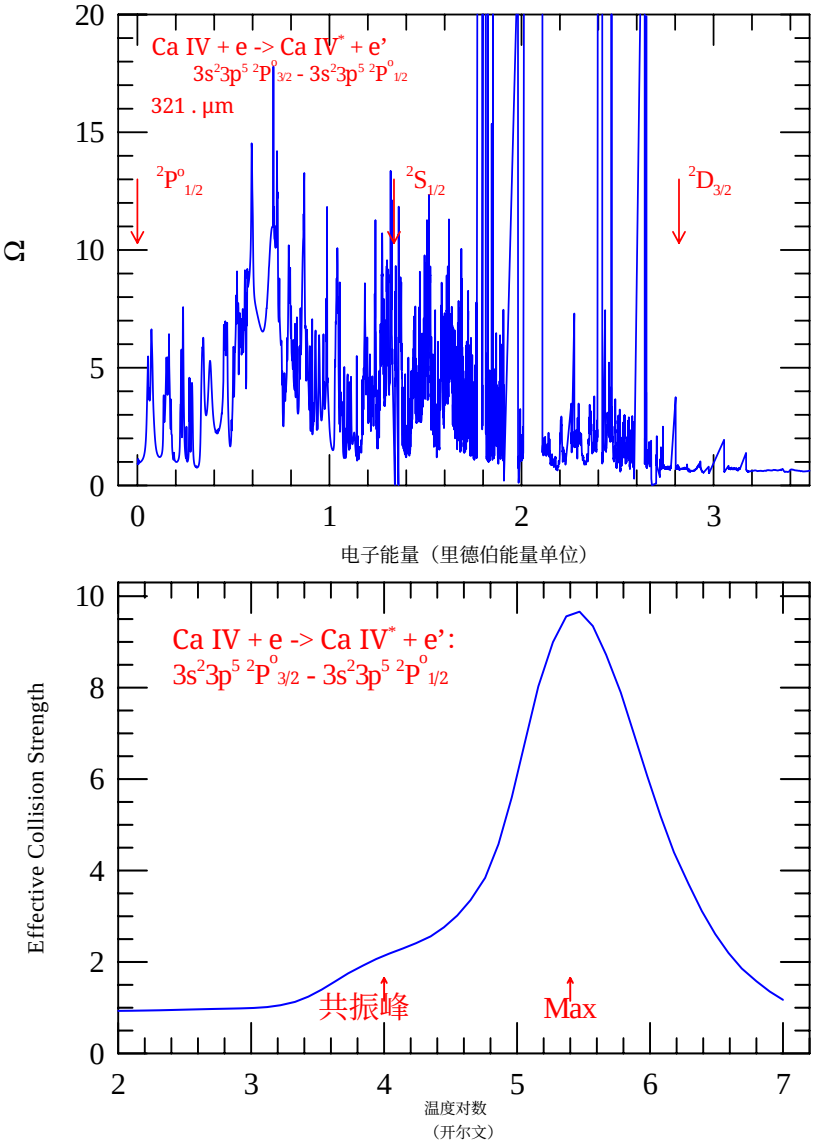


图 2 上图：Ca IV 基态的首次激发$3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3s^2 3p^5\ ^2P^o_{1/2}$对应的电子碰撞激发碰撞强度（Ω）随里德伯单位表示的散射电子能量变化。基态 $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2}$至 $^2D^o_{1/2}$的电偶极允许跃迁能区内可见大量共振，且背景增强。下图：Ca IV 中 $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3s^2 3p^5\ ^2P^o_{1/2}$激发的有效碰撞强度在约 3×10^5 K处呈现高峰值，表明詹姆斯·韦布空间望远镜探测到该谱线的概率很高。

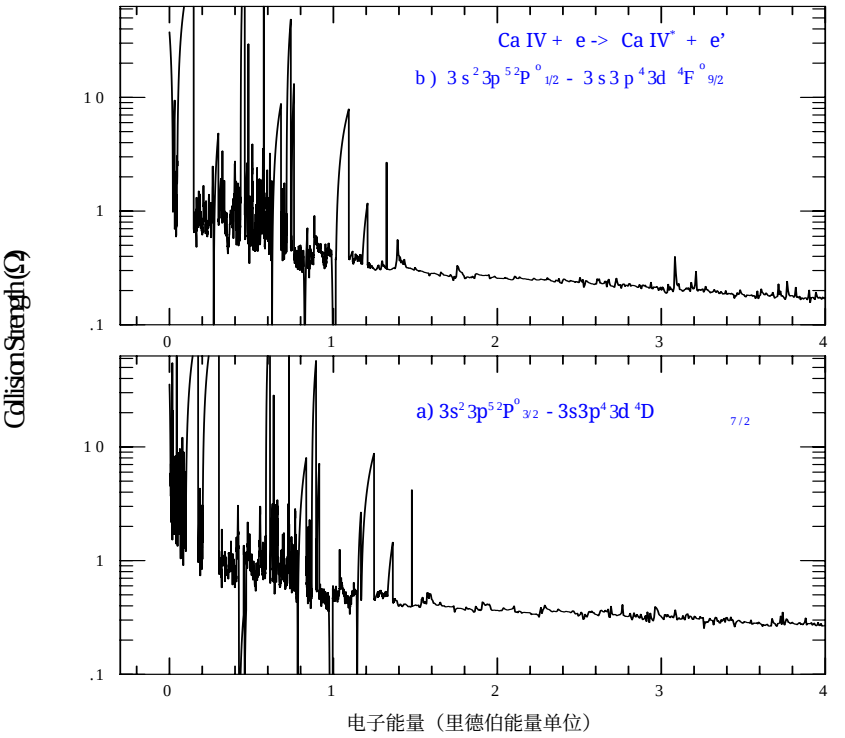


图 3 极紫外波段中禁戒激发的碰撞强度 a) $\Omega(3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3s^2 3p^4 4s\ ^4D_{7/2})$ 和 b) $\Omega(3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3s^2 3p^4 4s\ ^4F_{9/2})$，分别为 496 $\mathring{A}$ 和 458 $\mathring{A}$，展示了低能区的共振特征以及高能区逐渐减弱的背景。

$\Omega(3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3s^2 3p^4 4s^4 D_{7/2})$ 和 b) $\Omega(3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3s^2 3p^4 4s^4 F_{9/2})$。这两个跃迁在较低能量区域均存在强共振。随着能量升高，共振逐渐减弱，表明共振贡献正在收敛。这是禁戒跃迁的 Ω 的典型趋势。这两个跃迁都位于极紫外波段，波长分别为 496 和 458 $\mathring{A}$ 。

电偶极允许跃迁的碰撞强度在高能背景下可能呈现出不同于禁戒跃迁的趋势。靶中的电偶极会影响入射电子的分波，并对碰撞强度有所贡献。其贡献取决于电偶极跃迁的振子强度。对于较强的跃迁，纳入更多分波对于使贡献收敛至关重要。

图4展示了两个跃迁至低激发能级的电偶极允许跃迁的 Ω（EIE）特征：a) $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{1/2} - 3s3p^6\ ^2S_{1/2}$（能级 2-3），能量为 670

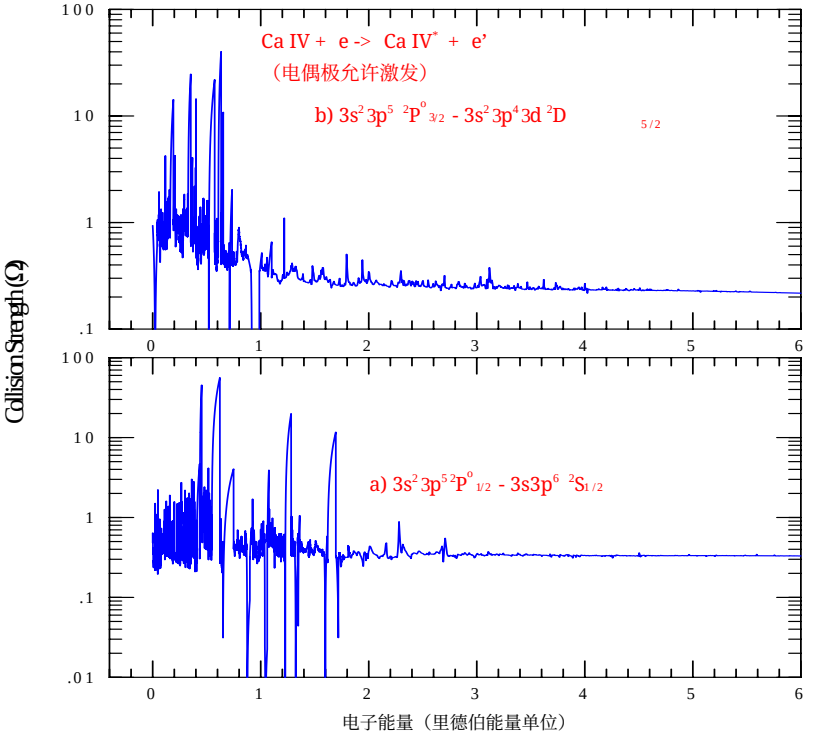


图4 两个较弱电偶极允许跃迁的Ω(EIE)特征（振子强度见表2）：a) $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{1/2} - 3s3p^6\ ^2S_{1/2}$（能级2-3）；b) 相对较高的跃迁$3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3s^2 3p^4 3d^2 D_{5/2}$（能级1-18）。在高能区，共振已收敛至平滑背景；背景几乎保持恒定，或随能量增加而缓慢下降，这是弱跃迁的典型特征。

$\mathring{A}$ 和 b) $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - 3p^4 3d\ ^2D_{5/2}$（能级 1-18），能量为 $435\ \mathring{A}$。这些跃迁的 Ω 在低能区域呈现出显著的共振，随着能量升高，共振逐渐减弱并趋于平滑背景。值得注意的是，高能背景下降得非常缓慢，或几乎保持恒定。与其他跃迁相比，这些跃迁弱得多，这一点可从表2中所列较小的振子强度和 A值看出。

图5展示了 Ca IV 中 a) $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - (3s^2 3p^4 3d)^2 D_{5/2}$ at $340\ \mathring{A}$ 和 b) $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - (3s^2 3p^4 4s)\ ^2P_{3/2}$ at $332\ \mathring{A}$ 的电偶极允许跃迁的碰撞强度 Ω。高峰值共振在接近 1 里德伯能量单位处趋于收敛。尽管波函数展开中纳入了更多芯离子激发，但归属于这些激发的里德伯系列共振已变得微弱，几乎没有对 Ω 作出贡献。这表明用于产生共振特征的波函数

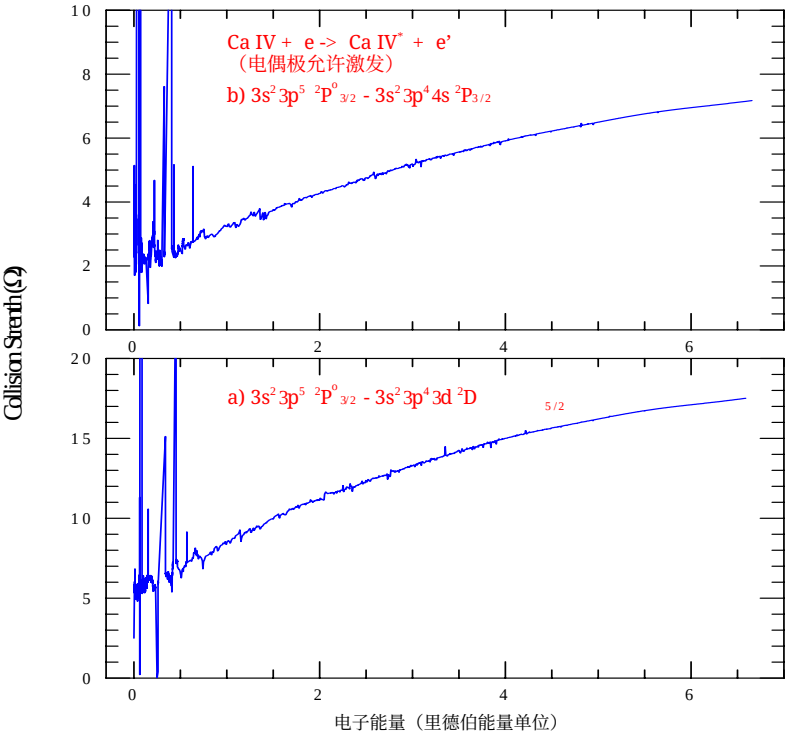


图5 激发至高能级电偶极允许跃迁能级时碰撞强度 Ω 的特征：a) $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2}$ –$(3s^2 3p^4 3d)\ ^2D_{5/2}$ 以及 b) $3s^2 3p^5\ ^2P^o_{3/2} - (3s^2 3p^4 4s)\ ^2P_{3/2}$，振子强度更强或更大，分别说明：(a) 共振的收敛；(b) 碰撞强度 Ω 在更高能量下呈现上升的 Coulomb-Bethe $ln(E)$ 行为。Ω 的背景逐渐升高并趋于形成平台。

展开已收敛。然而，Ω 的背景随能量升高而上升，趋向形成平台。这一趋势与高能下具有较强或较大振子强度或 A-值的跃迁所预期的 $\Omega_{if}(E) \sim_{E\to\infty} dln(E)$（公式10）库仑-贝特行为一致。表2列出了上述两种跃迁的 f-值和 A-值。如上所述，计算这些跃迁的 Ω 时需要考虑更多分波。趋向平台的上升趋势可能并非由分波数量不足所致。在这种情况下，通常会采用库仑-贝特形式对 Ω 进行外推。

天体物理模型需要温度相关有效碰撞强度（ϒ）。表3列出了 ϒ 一些对天体物理应用可能重要的能级的激发数据。通过对Ω在麦克斯韦分布上取平均，可以计算其余1431种跃迁中任意其他激发的 ϒ

表2 图4和图5中所示 Ca IV 碰撞强度示例中，能级 i 和 j之间的电偶极允许跃迁、其 f 和 A值，以及以埃为单位的跃迁波长 λ_{ij} 。能级索引 i 和 j 与表1中的相对应。

图	i - j	$SL\pi J$ i	$SL\pi J$ j	λ_{ij} ($\AA$)	f_{ij}	A_{ji}(s^{-1})
4a	2 - 3	$^2P^o_{1/2}$	$^2S_{1/2}$	670	1.55E-02	2.01E+08
4b	1 -18	$^2P^o_{3/2}$	$^2D_{5/2}$	435	8.14E-03	1.98E+08
5a	1 -33	$^2P^o_{3/2}$	$^2D_{5/2}$	319	2.60E+00	1.14E+11
5b	1 -30	$^2P^o_{3/2}$	$^2P_{3/2}$	332	1.09E+00	7.10E+10

在任意温度下的函数。Ω值以及 ϒ 除本文所列之外的若干激发数据，均可通过电子方式从 NORAD-Atomic-Data 获取 [27]。

4.2 Ca IV 的能级和辐射跃迁参数

我们给出了通过采用 Breit-Pauli近似的原子结构计算获得的 Ca IV 约 93000 个辐射跃迁速率，该近似由 SUPERSTRUCTURE 程序实现。计算部分列出的 Ca IV 的 13 个组态产生了 387 个精细结构能级，以及 93,296 个允许跃迁（E1）和禁戒跃迁（E2、E3、M1、M2）类型的辐射跃迁。

我们将计算得到的 Ca IV 能量与计算部分表1中的测量值进行了比较。它们与美国国家标准与技术研究院表中提供的观测能量符合良好。如表1所示，除最高的 $^4D^o$ 和 $^4F^o$ 态外，大多数能级的计算能量与测量能量之差均在 5% 以内；对于这两个态，差值约为 8%。

我们仅用数量有限的可用数据对 A值进行了基准检验。表4将本文的跃迁概率与美国国家标准与技术研究院汇编中仅有的 3 个可用 A值，以及其他来源的数据进行了比较。跃迁 $3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^5(^2P^o_{1/2})$ 可以同时属于磁偶极跃迁和电四极跃迁类型。本文得到的磁偶极跃迁 A值为 0.545，与 Naqvi [12]给出的 0.543 极为一致。考虑到 E1跃迁的 A值通常为 10^8 s^{-1} 或更高量级，本文数值也与 Huang等人 [16] 给出的 0.379 符合良好。类似地，对于极弱的电四极跃迁，本文的 A值为 3.82e-05 sec^{-1} ，也与 Huang等人 [16]给出的 1.906E-05 sec^{-1}非常一致。对于首个电偶极允许跃迁 $3s^23p^5(^2P^o_{3/2,\ 1/2}) \rightarrow 3s3p^6(^2S_{1/2})$，本文的 A值与 Wilson等人 [17], 的结果非常吻合，但与 Huang等人和 Varsavsky [13]的结果不同；后两者彼此之间以及与 Wilson等人的结果也存在差异。如表4所示，对于其他跃迁，本文结果与 Wilson等人的结果一致。

我们提供了两个计算得到的电偶极允许跃迁 A值，以便比较其准确性。第一个 A值是采用以下方法得到的

表 **3** ϒ 在不同温度下，Ca IV 中能级 1–2 至 1–18 的不同激发过程。

logT	T (K)	ϒ: 1-2	1- 3	2- 3	1- 4	1- 5
2.00	1.000E+02	9.312E-01	1.038E+00	5.709E-01	3.274E+01	2.158E-01
2.10	1.265E+02	9.339E-01	1.061E+00	5.674E-01	3.199E+01	2.395E-01
2.20	1.600E+02	9.382E-01	1.075E+00	5.587E-01	3.104E+01	2.827E-01
2.31	2.024E+02	9.439E-01	1.077E+00	5.447E-01	2.986E+01	3.545E-01
2.41	2.560E+02	9.507E-01	1.065E+00	5.261E-01	2.841E+01	4.608E-01
2.51	3.237E+02	9.581E-01	1.040E+00	5.037E-01	2.669E+01	6.014E-01
2.61	4.095E+02	9.654E-01	1.002E+00	4.791E-01	2.474E+01	7.688E-01
2.71	5.179E+02	9.722E-01	9.568E-01	4.537E-01	2.261E+01	9.507E-01
2.82	6.551E+02	9.785E-01	9.081E-01	4.294E-01	2.042E+01	1.134E+00
2.92	8.286E+02	9.851E-01	8.608E-01	4.081E-01	1.826E+01	1.315E+00
3.02	1.048E+03	9.948E-01	8.192E-01	3.909E-01	1.623E+01	1.503E+00
3.12	1.326E+03	1.014E+00	7.854E-01	3.784E-01	1.440E+01	1.724E+00
3.22	1.677E+03	1.054E+00	7.604E-01	3.702E-01	1.284E+01	2.002E+00
3.33	2.121E+03	1.127E+00	7.436E-01	3.654E-01	1.156E+01	2.335E+00
3.43	2.683E+03	1.242E+00	7.345E-01	3.634E-01	1.055E+01	2.690E+00
3.53	3.393E+03	1.395E+00	7.321E-01	3.635E-01	9.865E+00	3.018E+00
3.63	4.292E+03	1.572E+00	7.354E-01	3.655E-01	9.610E+00	3.292E+00
3.73	5.429E+03	1.752E+00	7.433E-01	3.694E-01	9.976E+00	3.553E+00
3.84	6.866E+03	1.920E+00	7.551E-01	3.750E-01	1.113E+01	3.947E+00
3.94	8.685E+03	2.064E+00	7.705E-01	3.844E-01	1.312E+01	4.689E+00
4.04	1.099E+04	2.185E+00	7.909E-01	4.056E-01	1.577E+01	5.927E+00
4.14	1.389E+04	2.294E+00	8.220E-01	4.587E-01	1.869E+01	7.609E+00
4.24	1.758E+04	2.411E+00	8.747E-01	5.748E-01	2.139E+01	9.464E+00
4.35	2.223E+04	2.560E+00	9.640E-01	7.800E-01	2.341E+01	1.113E+01
4.45	2.812E+04	2.759E+00	1.101E+00	1.073E+00	2.448E+01	1.232E+01
4.55	3.556E+04	3.016E+00	1.285E+00	1.419E+00	2.455E+01	1.288E+01
4.65	4.498E+04	3.353E+00	1.497E+00	1.762E+00	2.373E+01	1.282E+01
4.76	5.690E+04	3.841E+00	1.708E+00	2.047E+00	2.222E+01	1.224E+01
4.86	7.197E+04	4.576E+00	1.886E+00	2.241E+00	2.024E+01	1.130E+01
4.96	9.103E+04	5.599E+00	2.007E+00	2.331E+00	1.803E+01	1.015E+01
5.06	1.151E+05	6.818E+00	2.060E+00	2.323E+00	1.574E+01	8.907E+00
5.16	1.456E+05	8.028E+00	2.045E+00	2.234E+00	1.353E+01	7.674E+00
5.27	1.842E+05	8.996E+00	1.975E+00	2.088E+00	1.147E+01	6.514E+00
5.37	2.330E+05	9.559E+00	1.865E+00	1.907E+00	9.610E+00	5.464E+00
5.47	2.947E+05	9.661E+00	1.733E+00	1.711E+00	7.982E+00	4.541E+00
5.57	3.728E+05	9.347E+00	1.592E+00	1.516E+00	6.583E+00	3.745E+00
5.67	4.715E+05	8.718E+00	1.453E+00	1.332E+00	5.398E+00	3.072E+00
5.78	5.964E+05	7.893E+00	1.324E+00	1.165E+00	4.408E+00	2.509E+00
5.88	7.543E+05	6.978E+00	1.207E+00	1.018E+00	3.589E+00	2.044E+00
5.98	9.541E+05	6.058E+00	1.105E+00	8.908E-01	2.917E+00	1.663E+00
6.08	1.207E+06	5.187E+00	1.017E+00	7.837E-01	2.370E+00	1.352E+00
6.18	1.526E+06	4.398E+00	9.435E-01	6.943E-01	1.927E+00	1.101E+00
6.29	1.931E+06	3.705E+00	8.822E-01	6.205E-01	1.570E+00	8.981E-01
6.39	2.442E+06	3.112E+00	8.317E-01	5.602E-01	1.283E+00	7.353E-01
6.49	3.089E+06	2.612E+00	7.906E-01	5.113E-01	1.053E+00	6.050E-01
6.59	3.907E+06	2.198E+00	7.572E-01	4.718E-01	8.700E-01	5.010E-01
6.69	4.942E+06	1.857E+00	7.303E-01	4.400E-01	7.238E-01	4.181E-01
6.80	6.251E+06	1.579E+00	7.087E-01	4.146E-01	6.075E-01	3.521E-01
6.90	7.906E+06	1.354E+00	6.914E-01	3.942E-01	5.151E-01	2.997E-01
7.00	1.000E+07	1.173E+00	6.776E-01	3.780E-01	4.417E-01	2.580E-01

logT	T (K)	ϒ: 1-6	1- 7	1-12	1-13	1-18
2.00	1.000E+02	1.307E+00	4.810E-01	4.444E-01	8.154E-01	9.113E-01
2.10	1.265E+02	1.221E+00	4.936E-01	4.540E-01	8.560E-01	9.043E-01
2.20	1.600E+02	1.164E+00	5.075E-01	4.647E-01	9.006E-01	8.956E-01
2.31	2.024E+02	1.136E+00	5.222E-01	4.758E-01	9.425E-01	8.845E-01
2.41	2.560E+02	1.131E+00	5.374E-01	4.866E-01	9.756E-01	8.705E-01
2.51	3.237E+02	1.147E+00	5.526E-01	4.963E-01	9.969E-01	8.528E-01
2.61	4.095E+02	1.175E+00	5.670E-01	5.042E-01	1.008E+00	8.304E-01
2.71	5.179E+02	1.210E+00	5.797E-01	5.102E-01	1.014E+00	8.023E-01
2.82	6.551E+02	1.246E+00	5.902E-01	5.195E-01	1.028E+00	7.675E-01
2.92	8.286E+02	1.285E+00	5.983E-01	5.546E-01	1.077E+00	7.260E-01

表3（续）

logT	T (K)	ϒ: 1- 6	1- 7	1-12	1-13	1-18
3.02	1.048E+03	1.335E+00	6.038E-01	6.781E-01	1.206E+00	6.795E-01
3.12	1.326E+03	1.414E+00	6.065E-01	1.021E+00	1.485E+00	6.321E-01
3.22	1.677E+03	1.533E+00	6.080E-01	1.804E+00	2.005E+00	5.891E-01
3.33	2.121E+03	1.690E+00	6.163E-01	3.326E+00	2.872E+00	5.558E-01
3.43	2.683E+03	1.873E+00	6.615E-01	5.914E+00	4.173E+00	5.359E-01
3.53	3.393E+03	2.079E+00	8.171E-01	9.770E+00	5.920E+00	5.317E-01
3.63	4.292E+03	2.336E+00	1.199E+00	1.478E+01	7.988E+00	5.465E-01
3.73	5.429E+03	2.688E+00	1.911E+00	2.039E+01	1.011E+01	5.866E-01
3.84	6.866E+03	3.169E+00	2.955E+00	2.576E+01	1.198E+01	6.590E-01
3.94	8.685E+03	3.769E+00	4.202E+00	3.003E+01	1.332E+01	7.674E-01
4.04	1.099E+04	4.427E+00	5.432E+00	3.264E+01	1.402E+01	9.097E-01
4.14	1.389E+04	5.047E+00	6.429E+00	3.343E+01	1.406E+01	1.080E+00
4.24	1.758E+04	5.531E+00	7.061E+00	3.259E+01	1.357E+01	1.273E+00
4.35	2.223E+04	5.813E+00	7.294E+00	3.053E+01	1.268E+01	1.480E+00
4.45	2.812E+04	5.870E+00	7.175E+00	2.768E+01	1.154E+01	1.685E+00
4.55	3.556E+04	5.718E+00	6.789E+00	2.446E+01	1.029E+01	1.865E+00
4.65	4.498E+04	5.401E+00	6.230E+00	2.117E+01	9.026E+00	1.993E+00
4.76	5.690E+04	4.969E+00	5.576E+00	1.802E+01	7.809E+00	2.053E+00
4.86	7.197E+04	4.469E+00	4.890E+00	1.514E+01	6.679E+00	2.038E+00
4.96	9.103E+04	3.942E+00	4.216E+00	1.258E+01	5.656E+00	1.956E+00
5.06	1.151E+05	3.420E+00	3.583E+00	1.036E+01	4.749E+00	1.825E+00
5.16	1.456E+05	2.926E+00	3.009E+00	8.470E+00	3.957E+00	1.663E+00
5.27	1.842E+05	2.474E+00	2.502E+00	6.885E+00	3.277E+00	1.487E+00
5.37	2.330E+05	2.072E+00	2.064E+00	5.571E+00	2.700E+00	1.312E+00
5.47	2.947E+05	1.722E+00	1.691E+00	4.490E+00	2.215E+00	1.145E+00
5.57	3.728E+05	1.423E+00	1.378E+00	3.608E+00	1.812E+00	9.941E-01
5.67	4.715E+05	1.170E+00	1.118E+00	2.892E+00	1.479E+00	8.604E-01
5.78	5.964E+05	9.593E-01	9.047E-01	2.314E+00	1.207E+00	7.448E-01
5.88	7.543E+05	7.849E-01	7.303E-01	1.849E+00	9.842E-01	6.467E-01
5.98	9.541E+05	6.418E-01	5.888E-01	1.477E+00	8.038E-01	5.646E-01
6.08	1.207E+06	5.252E-01	4.744E-01	1.179E+00	6.582E-01	4.965E-01
6.18	1.526E+06	4.307E-01	3.824E-01	9.408E-01	5.410E-01	4.407E-01
6.29	1.931E+06	3.544E-01	3.087E-01	7.513E-01	4.471E-01	3.953E-01
6.39	2.442E+06	2.931E-01	2.497E-01	6.007E-01	3.719E-01	3.585E-01
6.49	3.089E+06	2.440E-01	2.027E-01	4.809E-01	3.119E-01	3.288E-01
6.59	3.907E+06	2.047E-01	1.652E-01	3.859E-01	2.641E-01	3.050E-01
6.69	4.942E+06	1.734E-01	1.354E-01	3.106E-01	2.261E-01	2.859E-01
6.80	6.251E+06	1.485E-01	1.117E-01	2.508E-01	1.959E-01	2.707E-01
6.90	7.906E+06	1.287E-01	9.292E-02	2.035E-01	1.719E-01	2.586E-01
7.00	1.000E+07	1.129E-01	7.802E-02	1.661E-01	1.529E-01	2.490E-01

第一行采用实验跃迁能，下面的第二行采用计算能量。可以看出，这两者本身并没有显著差异。由于每次计算所包含的组态采用了不同的优化方式，以及用于计算跃迁参数的方法精度不同，结果之间存在一些差异是预期之中的。

本文工作在一个文件中提供了全部386个激发能级的寿命，该文件可通过电子方式从 NORAD-Atomic-Data 获取 [27]。如果已知某个激发能级向较低能级跃迁的 A值或辐射衰变率，就可以计算该能级的寿命。实验装置可以测量寿命。表5列出了若干能级的寿命，以说明其数值。对于表中的每个激发能级，均给出了能级编号、组态编号、光谱学符号和能量。随后列出该能级向较低能级衰变的 A值。将这些 A值相加，再取其倒数，即可得到寿命。通过禁戒

表4 本文工作计算的 Ca-IV 的 A值与文献中已有数据的比较。对于 E1跃迁，本文工作给出的第一个 A值采用实验跃迁能，第二个 A值（列于其下）采用计算能量。K、KP 为跃迁的初始和末态能级指标（见表1），λ 为跃迁波长，单位为 $\mathring{A}$ 。参考文献以上标形式标出。

K	KP	λ ($\mathring{A}$)	跃迁	A（本文）(秒$^{-1}$)	A（其他）(秒$^{-1}$)
1	2		$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^5(^2P^o_{1/2})$	磁偶极跃迁:0.545	磁偶极跃迁:0.541[12],0.3786[16]
1	2		$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^5(^2P^o_{1/2})$	电四极跃迁:3.82e-5	电四极跃迁:1.906E-5[16]
1	3	656	$3s^23p^5\ (^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s3p^6\ (^2S_{1/2})$	5.11E+8 4.22E+8	7.425E+8[17],1.20E+10[13], 1.09e+10[16]
2	3	669.7	$3s^23p^5(^2P^o_{1/2}) \rightarrow 3s3p^6(^2S_{1/2})$	2.466E+8 2.01E+8	3.529E+8[17], 5.4E+9[13]
1	10	454.6	$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d(^4F_{5/2})$	1.84E+6	1.692E+6[17]
1	12	543	$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d(^2P_{1/2})$	9.696E+6 9.57E+6	7.889E+6[17]
2	12	459.5	$3s^23p^5\ (^2P^o_{1/2}) \rightarrow 3s^23p^43d\ (^2P_{1/2})$	3.930E+7 3.87E+7	3.503E+7[17]
1	14	440	$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d(^4P_{1/2})$	1.350E+7 1.31E+7	1.243E+7[17]
1	15	439	$3s^23p^5\ (^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d\ (^4P_{3/2})$	3.90E+6 3.77E+6	5.367E+6[17]
1	16	437.3	$3s^23p^5\ (^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d\ (^4P_{5/2})$	2.740E+6 2.66E+6	2.754E+6[17]
1	17	437.8	$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d(^2D_{3/2})$	6.530E+7 6.45E+7	5.201E+7[17]
1	18	434.6	$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d(^2D_{5/2})$	1.920E+8 1.90E+8	1.576E+8[17]
1	27	341.3	$3s^23p^5(^2P^o_{3/2}) \rightarrow 3s^23p^43d(^2S_{1/2})$	6.23E+10 6.43E+10	4.264E+10[17],6.543E+10[17]

跃迁（E2、E3、M1、M2）衰变的能级，其寿命长于通过偶极允许跃迁（同自旋电偶极跃迁 E1d 和互组合电偶极跃迁 E1i）衰变的能级。文献中未找到可用于比较的 Ca IV 能级寿命。不过，其准确度与 A值有关，表4中已对此进行讨论。

5 结论

我们采用54能级密耦合波函数展开研究了 Ca IV 的碰撞强度，该展开对应于靶离子向高能级的激发。这确保了纳入所有能级产生的共振的收敛贡献。我们展示了分波数量对碰撞强度 Ω 的影响，并证明了对碰撞强度有贡献的分波已收敛。

碰撞强度的特征显示，低能区存在共振，但在达到 Ca IV 的最高第 54 个激发之前，共振便已收敛至背景值。我们发现，由基态组态 $3s^23p^5$ 的$^2P^o_{3/2} -^2 P^o_{1/2}$ 碰撞激发所产生的 3.2 μm 发射线，其碰撞强度具有大量共振，且

表5：若干能级的寿命，用以展示全部386个能级的完整寿命表。给出了能级 j 到各较低能级的辐射衰变率 $j \to i$。符号 C 表示组态，g 表示统计权重因子，lv 表示能级，f 表示 E1跃迁的 f值或电四极跃迁、电八极跃迁、磁偶极跃迁和磁四极跃迁的 S值，A 表示 A值，E 表示跃迁能量。

Type	LSi	Ci	gi	lvi	LSj	Ci	gj	lvj	f(E1)/S(电四极跃迁, 电八极跃迁、磁偶极跃迁、磁四极跃迁)	Aji (秒$^{-1}$)	Eij (Å)
寿命：ss能级 j=		2,	Cf= 1,	$^2P^o_{1/2}$	[E= 3.019E-02 里德伯能量单位= 3.3134852E+03 /cm]						
E2	$^2P^o$	1	4	1	$^2P^o$	1	2	2	1.54E+00	5.180E-05	3.0180E+04
M1	$^2P^o$	1	4	1	$^2P^o$	1	2	2	1.33E+00	6.540E-01	3.0180E+04
A值总和：Af（禁戒）= 6.541E-01，Aa（允许跃迁）= 0.000E+00 s-1											
总和 Sum(Af+Aa)= Aji（2 个跃迁）至能级= 6.541E-01 s-1											
寿命（=1/Aji）= 1.529E+00 s											
寿命：ss能级 j=		7,	cf= 3,	$_4D_{1/2}$	[E= 1.826E+00 里德伯能量单位= 2.0041544E+05 /cm]						
E1i	$^2P^o$	1	4	1	^4D	3	2	7	1.01E-06	5.420E+04	4.9896E+02
E1i	$^2P^o$	1	2	2	^4D	3	2	7	3.96E-06	1.030E+05	5.0735E+02
E2	^2S	2	2	3	^4D	3	2	7	0.00E+00	0.000E+00	1.7417E+03
M1	^2S	2	2	3	^4D	3	2	7	3.18E-07	8.120E-04	1.7417E+03
E2	^4D	3	6	5	^4D	3	2	7	1.15E-03	2.890E-12	2.0196E+05
E2	^4D	3	6	5	^4D	3	2	7	1.15E-03	2.890E-12	2.0196E+05
E2	^4D	3	4	6	^4D	3	2	7	2.69E-03	1.120E-13	4.5789E+05
M1	^4D	3	4	6	^4D	3	2	7	5.97E+00	8.380E-04	4.5789E+05
A值总和：Af（禁戒）= 1.650E-03，Aa（允许跃迁）= 1.572E+05 s-1											
总和 Sum(Af+Aa)= Aji（8 个跃迁）至能级= 1.572E+05 s-1											
寿命（=1/Aji）= 6.361E-06 s											

在低能区背景值增强。这使得有效碰撞强度 Υ 显著增大，并在约 3×10^5 K 处达到峰值，表明当环境等离子体效应较弱时，存在明显的发射线。3.2 μm 发射线位于詹姆斯·韦布空间望远镜的波长范围内。

目前的碰撞强度在高电子能量下呈现出预期特征，例如：禁戒跃迁的背景衰减，弱电偶极跃迁的缓慢衰减或近乎恒定，以及强电偶极允许跃迁的库仑-贝特 ln(E) 行为逐渐上升并趋于平台。

我们给出了 Ca IV 中 387 个能级之间的 93,000 多个辐射跃迁，所涉及的轨道最高到 5s。结果还包括全部 386 个激发能级的寿命。

预计本研究结果具有较高精度且足够完备，可使这两种过程在各种实际应用中实现完整的天体物理建模。

数据可用性。有关能量、辐射跃迁、碰撞激发以及一组跃迁的有效碰撞强度的所有原子数据，均可在线获取，网址为俄亥俄州立大学 NORAD原子数据数据库：https://norad.astronomy.osu.edu/

致谢。所有计算均在俄亥俄超级计算中心的高性能计算机上完成。BS 感谢巴基斯坦政府提供的 IRSIP 研究奖学金，使其得以在俄亥俄州立大学开展研究。

声明

两位作者 S.N. Nahar 和 B. Shafique 对论文内容的贡献相同。SNN 培训了 BS，建立了项目，编写了所需程序，并持续参与项目研究；BS 则负责计算工作的各个方面，完成了计算，并参与了分析。

参考文献

[1] Shore SN, Augusteijn T, Ederoclite A, 和 Uthas H 2011《天文学与天体物理学》533 L8[2] Asplund M, GrevesseN, Sauval AJ, 和 Scott P，2009《天文学与天体物理学年评》47, 481–52[3] Shepherd J 2019, https://www.astrobin.com/full/406485/0/[4] Jacobson-Galan W V 等, 2020, 《天体物理学杂志》898 166[5] Feuchtgruber H 等 1997《天体物理学杂志》487 962[6] Ignanc R, Cassinelli JP, Quigley M, Babler B 2001《天体物理学杂志》558 771-779[7] Feuchtgruber H, Lutz D, Beintema D A 2001《天体物理学杂志增刊》136 221[8] Zuckerman B, Koester D, Reid I N, 和 Hunsch M 2003《天体物理学杂志》596 477[9] Pradhan A K 和 Nahar S N 2011《原子天体物理学与光谱学》（剑桥大学出版社，纽约）[10] Sugar J 和 Corliss C 1985《物理与化学参考数据杂志》14，增刊2 1-664[11] https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels form.html [12] Naqvi A M 1951 博士论文，哈佛大学，192页（数据可在美国国家标准与技术研究院获取）[13] Varsavsky C M 1961《天体物理学杂志增刊丛刊》6 75-107[14] Fawcett B C 和 Gabriel A H 1966《物理学会会刊》88 262[15] Gabriel A H, Fawcett B C, Jordan C 1966《物理学会会刊》87 825[16] Huang K -N, Kim Y -K, Cheng K T 和 Desclaux J P 1983《原子数据与核数据表》28 355-377[17] Wilson N J, Hibbert A 和 Bell K̄ L，2000《物理学文摘》61 603-610

[18] Hummer D G, Berrington K A, Eissner W, Pradhan A K, Saraph H E, 和 Tully J A 1993《天文学与天体物理学》279 298-309[19] Berrington K A, Eissner W, 和 Norrington P H 1995《计算物理通信》92 290-420[20] Eissner W, Jones M 和 Nussbaumer H 1974《计算物理通信》8, 270-306 [21] Nahar S N, Eissner W, Chen G X 和 Pradhan A K 2003《天文学与天体物理学》408 789[22] Burgess A 和 Tully JA 1978《物理学杂志B》11 4271[23] Burke P G 和 Robb W D 1975《原子与分子物理学进展》11 143-214[24] Scott N S 和 Burke P G 1980《物理学杂志B》12 4299[25] Scott N S 和 Taylor K T 1982《计算物理通信》25 347[26] Nahar S N，撰写于2013年，未发表[27] NORAD-Atomic-Data：https://norad.astronomy.osu.edu/