期刊名称

Crossmark

收稿日期dd Month yyyy修订日期dd Month yyyy

论文电子碰撞激发的相对论计算 中性钨的截面

Ritu Dey[1], *, Ayushi Agarwal[2], **, ReeteshKumar Gangwar[1], Deepti Sharma[3], M. B. Chowdhuri[3,4], Rajesh Srivastava[2], 和 Joydeep Ghosh[3,4]

[1] 印度理工学院蒂鲁帕蒂分校物理系，耶尔佩杜 517619，印度[2] 印度理工学院鲁尔基分校物理系，鲁尔基 247667，印度[3] 等离子体研究所，甘地讷格尔 382428，印度[4] 霍米·巴巴国家研究所，培训学校综合区，阿努沙克蒂纳加尔，孟买 400094，印度

*如有任何疑问，请联系作者。
**现工作于卢森堡大学，贝尔瓦尔，卢森堡

电子邮件： deyritu1@gmail.com

arXiv:2603.02612v1 [physics.atom-ph] 3 Mar 2026

摘要

可靠的钨光谱学对于含钨等离子体的建模与诊断至关重要，尤其是在边缘/偏滤器条件下，中性钨（W I）由溅射产生并贡献可见光/近紫外发射。要定量解释此类光谱，需将内部一致的原子结构数据（能级能量、辐射速率）和电子碰撞激发（EIE）数据作为碰撞辐射模型的输入。本文采用相对论扭曲波（RDW）方法，给出了中性钨的精细结构分辨电子碰撞激发截面。靶态由多组态狄拉克–福克（MCDF）波函数描述，并使用大规模组态相互作用（CI）展开，其中通过空穴组态和更深芯层组态纳入了价价关联和芯价关联。所得能量与现有理论结果以及NIST数据库中的推荐值进行了基准比较。本文报告了从基态能级$5d^4 6s^2$ ($^5D_0$)及六个亚稳态能级$5d^4 6s^2$ ($^5D_1$, $^5D_2$, $^5D_3$, $^5D_4$, $^3P_0$)和$5d^5(^6S)6s$ ($^7S_3$)激发至主要属于$5d^4 6s(^6D)6p$和$5d^5(^6S)6p$组态的激发能级的精细结构分辨截面，入射电子能量范围为从阈值至500电子伏特。除少数此前已研究的跃迁外，本文首次给出了大多数所报告的精细结构分辨截面。结果表明，截面强烈依赖于初始能级，并显示在所考虑的各态中，从亚稳态激发所得截面最大，凸显了亚稳态布居在中性钨建模中的重要性。此外，本文计算了若干显著跃迁的辐射跃迁概率，并与现有数据进行了比较。预计本数据集将有助于 ∼ 1-50电子伏特范围内钨等离子体的碰撞辐射建模和光谱诊断。

关键词：中性钨；电子碰撞激发；相对论扭曲波方法；截面

1 引言

钨是磁约束聚变中的关键面向等离子体材料，因为它具有极高的熔点、优异的热机械性能、在许多运行条件下相对较低的侵蚀率，以及较低的氚滞留率。因此，钨被广泛用于偏滤器和壁部件，并将在现有装置和 ITER 级反应堆的等离子体-表面相互作用中继续发挥核心作用 [1]。与此同时，钨是具有 74 个电子的高原子序数元素，一旦进入受约束的等离子体，便会成为非常高效的辐射体。即使钨的浓度极低，也可能造成显著的辐射功率损失及相应的等离子体冷却，直接影响约束、运行裕度和等离子体控制。因此，定量理解壁面钨源的产生、杂质在边缘区域的输运，以及不同电荷态下的辐射行为，对于预测建模和诊断驱动运行都至关重要。

在高温核心等离子体中，高电荷态钨离子主导从真空紫外/极紫外到软 X 射线谱段的辐射损失，已有大量文献涉及这些

电荷态[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]。相比之下，中性和低电荷态与边缘区/偏滤器区以及近表面源物理最为相关：溅射钨最初以中性中性钨的形式进入等离子体，并且根据具体条件，在电离之前可能在相当长的路径上保持中性。此外，可见光/近紫外中性钨谱线经常被观测到，并被用作钨流入通量和侵蚀的指标 [9, 10, 11, 12, 13]。这些中性谱线对于实验室等离子体以及使用钨作为诊断发射体的装置也十分重要。因此，中性钨的原子动力学是边界处钨杂质建模的必要组成部分，也是将钨光谱学作为常规诊断手段的重要要素。

要以具有定量意义的方式解读钨发射光谱，需要采用碰撞辐射建模（CRM），通过辐射和碰撞过程构成的网络，将等离子体参数与能级布居和谱线发射率联系起来。在这一框架下，原子结构和碰撞数据决定了钨对特定等离子体环境的响应方式。对于中性钨，关键的原子数据包括精细结构能级能量及其排序、跃迁波长和辐射速率（A-值），以及将基态和亚稳态与辐射最强的激发组态相连接的电子碰撞激发（EIE）截面或速率系数。这些数据集的重要性并非仅仅停留在形式上：例如，广泛使用的 S/XB 概念用于估算杂质通量和侵蚀 [13], ，它明确依赖于激发速率，以及激发导致在测量谱线中产生光子发射、而非经由竞争性的辐射或碰撞通道转移的概率。类似地，碰撞辐射模型（CRMs）需要可靠的激发数据，因为在低密度边缘等离子体中，能级布居通常远离玻尔兹曼平衡；亚稳态布居、级联和辐射俘获往往对谱线强度起决定性作用。因此，缺失或不一致的激发截面和辐射参数会直接导致反演钨流入通量及模拟光谱发射率时出现系统误差。

从原子物理的角度来看，中性钨尤其具有挑战性，这是因为其具有开放的 $5d$ 壳层以及显著的相对论效应。基态组态 $[Xe]4f^{14}5d^{4}6s^{2}$ 产生了由大量精细结构能级组成的密集能级组，并伴随强烈的组态相互作用和显著的自旋-轨道混合。由于这种复杂性，能级能量和项指认可能对组态相互作用（CI）展开以及电子关联的处理方式（包括涉及 $5p$ 壳层的芯价关联）十分敏感，因此要获得同时具有高精度且计算上可处理的靶结构并非易事。其次，强烈的混合可以激活在严格的 LS 耦合选择定则下名义上属于“禁戒”的激发通道，从而使激发强度重新分配到许多间隔很近的能级之间。第三，由于许多低能级具有较长寿命，在典型的边缘/偏滤器条件下，亚稳态可能积累显著的布居数；来自亚稳初始能级的电子碰撞激发（EIE）也可能与来自基态能级的激发同样重要，甚至更加重要。这些特征中的每一项都会使原子数据的构建及其在建模中的使用变得更加复杂：如果数据集仅限于来自基态的少数几个跃迁，或者遗漏了关键的亚稳通道，那么它通常不足以支持预测性碰撞辐射模型应用。

鉴于这些挑战，本研究着重计算中性钨的原子结构，以获得合理的精细结构能量和感兴趣能级的波函数，尤其是低能亚稳态以及主导可见光/近紫外发射的激发组态。其次，我们计算了相应的电子碰撞激发截面，采用与该结构描述相一致的散射方法，涵盖主要激发通道，入射电子能量范围则适用于边缘等离子体和实验室等离子体。已有研究 [14, 15] 在这两个方面都取得了进展，但整体图景仍不完整：尽管已有大量研究探讨高电荷态钨离子 [16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25] , , 精细结构分辨的中性钨碰撞数据集仍相对稀少，往往仅限于选定谱线或有限的能量区间 [14, 15, 26]。在实际建模中，钨的诊断通常依赖少数几条观测谱线，但这些谱线的布居来自更庞大的激发与级联通道网络。因此，激发数据不完整不仅会影响绝对发射率，还会影响谱线比、亚稳态敏感性以及推断等离子体参数的可靠性。

本文通过提供一套扩展且内部一致的中性钨原子结构和电子碰撞激发截面数据集，满足了这一需求；该数据集适用于碰撞辐射模型的实现和诊断解释。我们采用包含大量组态相互作用的多组态狄拉克-福克（MCDF）方法计算精细结构能级结构，随后使用 Flexible Atomic Code（FAC） [27] 中实现的相对论扭曲波（RDW）方法计算电子碰撞激发截面。之所以选择 MCDF+组态相互作用靶描述，是因为相对论效应和强烈的组态混合对中性钨至关重要；而 FAC 则提供了一个实用且广泛使用的平台，可生成大量一致的结构与碰撞数据。基于这一框架，我们重点研究从

基态能级 $5d^46s^2$ (^{5}D$_0$) 以及一组寿命较长的低能亚稳态能级，即 $5d^46s^2$(^{5}D$_{1-4}$, $^3P_0$) 和 5d^5(^{6}S)6s ($^7S_3$)，跃迁至主要属于 $5d^46s^2$ 和 5d^5(^{6}S)6p 组态的激发能级。这些激发组态十分重要，因为其中包含许多在钨诊断中常用的强可见光/近紫外跃迁。电子碰撞激发计算从阈值能量起，覆盖至 500 电子伏特的入射电子能量范围，适用于广泛的等离子体条件，并有助于在边缘等离子体相关温度范围内构建麦克斯韦平均速率系数。

本研究的一个显著特点是明确考虑了多个初始亚稳态能级，而非仅关注基态激发。这一点对中性钨至关重要，因为其低能精细结构能级组中存在寿命足够长、可在典型边界等离子体条件下积累的亚稳态。在碰撞-辐射建模中，亚稳态可作为激发的替代“起点”，其耦合强度以及通向末态的可达性往往有很大差异。因此，进入对诊断至关重要的上能级的有效激发速率可能强烈依赖于亚稳态。我们的计算通过给出各选定初态的截面，并比较其在不同跃迁中的大小及能量依赖性，量化了这种依赖关系。特别是，我们发现，对于许多重要通道而言，从 5d^5(^{6}S)6s($^7S_3$) 激发所产生的截面，在所考虑的初态中最大；而 $5d^46s^2$五重态亚稳态则提供了其他强跃迁路径，可能改变预测的布居数。这意味着，即使观测到的谱线源自基态，忽略亚稳态的诊断建模仍可能导致发射率估算错误，因为流入上能级组的布居流可能主要由亚稳态激发及其后续级联布居所主导。除了碰撞数据之外，同时呈现原子结构结果的另一个原因是，在中性钨这类重原子体系中，能级能量和混合的不确定性会直接传递到碰撞强度和阈值行为中。近阈值截面对激发能尤其敏感；在计算进入间隔很小的精细结构能级组的激发时，低能级的正确排序和间隔十分重要。因此，我们将计算所得能级与推荐数据集（例如美国国家标准与技术研究院汇编的数据） [28]以及现有理论计算 [14, 15], 进行基准比较，并讨论当前组态相互作用模型在多大程度上再现了与后续电子碰撞激发计算相关的关键低能结构。除了碰撞数据，我们还计算了选定跃迁的辐射参数（A值）。

对于复杂的重中性原子，RDW 方法在物理真实性与可处理性之间实现了平衡。密耦合方法（如 R 矩阵方法）能够描述阈值附近的共振结构，而这些结构可在低温下显著增强有效碰撞强度。然而，由于靶原子复杂性极高且激发谱密集，这类计算用于中性钨时会变得极为复杂。扭曲波方法虽然通常无法完整处理近阈值共振，但仍是生成涵盖众多能级和宽能量范围的激发数据集的实用工具；尤其是在重点为碰撞-辐射建模提供所需的广泛覆盖，而非解析少数跃迁的共振精细结构时，更是如此。因此，本研究采用 RDW 方法，为大量跃迁生成精细结构分辨截面，并将部分谱线的计算结果与现有文献数据进行比较，以评估总体一致程度，并指出共振物理可能变得重要的情形。

所得数据集旨在支持存在中性钨、并利用可见光/近紫外发射进行推断的等离子体条件下的钨等离子体诊断与建模。在边缘等离子体和偏滤器等离子体中，电子碰撞激发截面和辐射分支比的不确定性会直接影响预测发射率，以及通过 S/XB 型方法推断的钨流入通量。更广泛而言，可靠的中性钨数据能够改进将杂质输运与辐射耦合起来的碰撞辐射模型，并有助于更一致地解读稳态和瞬态等离子体条件下的钨谱线发射。本研究报告了从基态和关键亚稳态到主要 $6p$ 激发组态的截面，并在一致的相对论框架下提供辅助结构数据和辐射数据，旨在减少中性钨建模中长期存在的一项原子数据瓶颈。

本文其余部分安排如下。第 2 节概述相对论扭曲波方法的理论基础。第 3 节介绍中性 W 跃迁的能级和电子碰撞激发截面，重点关注精细结构分辨。此外，还给出了中性 W 发射光谱中显著谱线的辐射跃迁概率。第 4 节给出结论。

2 理论

本研究采用 FAC 中的相对论扭曲波理论，计算从基态和亚稳态出发的电子碰撞激发截面。靶原子的初态 (a) 和末态

(b) 的跃迁矩阵元 (T) 表示为 [29],

$$T^{RDW}_{a\to b}(J_{a(b)}, M_{a(b)}, \mathbf{k_{a(b)}}, \mu_{a,(b)}, \theta) = \langle \Phi^{rel}_b(1,2,...,N) F^{DW-}_{b,\mu_b} (k_b, N+1)|V-U|A\Phi^{rel}_a(1,2,...,N) F^{DW+}_{a,\mu_a}(k_a, N+1)\rangle \tag{1}$$

其中， F^{DW-}_a和 F^{DW+}_b分别表示入射和出射入射电子的相对论扭曲波函数，其波矢为$\mathbf{k^{a(b)}}$，并具有自旋分量。 Φ_a 和 Φ_b 分别表示靶原子中含有 N 个电子的相对论束缚态波函数。在式（1）中，J_a、 M_a 分别是初始束缚态的总角动量和磁量子数；而 J_b、 M_b 则是激发过程后末态束缚态中的相同量。“A”是反对称化算符，确保总波函数满足费米–狄拉克反对称性。在相对论扭曲波近似中，入射电子和散射电子由受 U（r）静电势扭曲的波函数描述。扭曲势 U(r) 通常为原子的球平均静态势。V 是靶原子与入射电子之间的相互作用势，如下所示:

$$V = -\frac{Z}{r_{N+1}} + \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{r_i - r_{N+1}}, \tag{2}$$

r_i (i $= 1, 2, ..., N$) 是靶原子中第 ith个束缚电子的位置矢量，均以原子核为参照测量。因此，如果靶原子有 N 个电子，就有 N 个这样的矢量。 r_{N+1} 表示入射（入射电子）的位置，同样以该原子核为参照测量。使用下标“N+1”，是因为系统中的电子总数为靶原子与入射电子的电子数之和。扭曲势表示为 [21]:

$$U(r_{N+1}) = -\frac{Z}{N+1} + \sum_{q\in all\ \ subshells} N_q \int_0^\infty \left[P^2_{n_q\kappa_q}(r) + Q^2_{n_q\kappa_q}(r)\right] \frac{1}{r_>}, \tag{3}$$

其中， N_q 是 qth 亚壳层的占据数，其中的电子由量子数 n_q、 κ_q表示。 P 和 Q 分别表示原子轨道径向波函数的较大分量和较小分量。在式 (1) 中， J_a、 M_a 分别是初始束缚态的总角动量和磁量子数；而 J_b、 M_b 则是激发过程后末态束缚态中的相同量。 “A”是反对称化算符，用于确保总波函数满足费米–狄拉克反对称性。 F^{DW-}_a和 F^{DW+}_b分别是入射和出射入射电子的相对论扭曲波函数，表示如下:

$$F^{DW\pm}_{a(b),\mu_{a(b)}}(\mathbf{k_{a(b)}}, N+1) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\frac{E_{a(b)}+c^2}{2E_{a(b)}}\right]^{1/2} \sum_{\kappa m} 4\pi i^l e^{\pm i\eta_\kappa} a^{\mu_{a(b)}}_{a(b),\kappa m}(\widehat{k_{a(b)}}) \frac{1}{r} \begin{pmatrix} f_\kappa(r) & \chi_{\kappa m}(\hat{r}) \\ ig_\kappa(r) & \chi_{-\kappa m}(\hat{r}) \end{pmatrix}. \tag{4}$$

其中， η_κ 是分波的相移， f_κ 和 g_κ 分别是径向波函数的大分量和小分量， $\chi_{\pm\kappa m}$ 是自旋球谐函数，k 和 μ 分别是入射电子的动量和自旋投影。E为相对论能量，表示为: $E_{a(b)} = \sqrt{k^2_{a(b)}c^2 + c^4}$。最后，激发截面表示为:

$$\sigma_{ab} = (2\pi)^4 \frac{k_b}{2(2J_a+1)k_a} \int |T^{RDW}_{a\to b}|^2. \tag{5}$$

由于相对论扭曲波理论本质上具有微扰性，因此其在近阈值（低能）区域的准确性有限。因此，引入修正因子，以提高低入射电子能量下截面的可靠性。修正后的截面表示为入射电子能量的函数，如下所示 [30]:

$$\sigma_{ab[corrected]} = [1 - (E_{threshold}/E)^{\frac{1}{2}}]\sigma_{ab}. \tag{6}$$

此处， E 对应入射电子能量，而 $E_{threshold}$ 对应从能级 a 跃迁至 b的激发阈值。激发阈值能量 $E_{thresold}$由能量差 $E_j - E_i$ 计算得出，其中 E_i 和 E_j 分别为下一节表格中列出的初态和末态能量: 1 。

3 结果与讨论：

本次计算所研究的中性钨精细结构谱基于大规模组态展开。该模型包含由大量激发态组态产生的共43,556 个精细结构分辨能级。本次计算所采用的组态如下：$5p^6 5d^4 6[s^2,p^2,d^2]$, $5p^6 5d^4 6s6[p,d]$, $5p^6 5d^4 6s7[s,p,d,f]$, $5p^6 5d^6$,$5p^6 5d^3 6s6[p^2,d^2]$, $5p^6 5d^2 6s^2 6p^2$, $5p^6 5d^2 6s^2 6d^2$, $5p^6 5d^4 7s^2$, $5p^6 5d^3 6s7s^2$, $5p^6 5d^2 6s^2 7s^2$, $5p^6 5d^3 6s^2 6d$, $5p^6 5d^5 7s$, $5p^6 5d^3 6s^2 7s$, $5p^6 5d^5 6[s,p,d]$, $5p^6 5d^3 6s^2 6p$, $5p^6 5d^3 6p^3$, $5p^6 5d^2 6s6p^3$, $5p^6 5d^4 6s8[s,p,d,f]$,$5p^6 5d^4 6s9[s,p,d,f]$, $5p^6 5d^3 6s^2 7p$, $5p^6 5d^5 7p$, $5p^6 5d^4 6s5f$, $5p^6 5d^5 5f$, $5p^6 5d^3 6d^3$, $5p^6 5d6s^2 6d^3$, $5p^5 5d^5 6s6p$,
$5p^5 5d^6 6p$, $5p^5 5d^6 6s$, $5p^5 5d^7$, $5p^5 5d^5 6s^2$, $5p^5 5d^5 6s7[s,p,d]$, $5p^5 5d^5 6s8[s,p,d]$, $5p^5 5d^6 6p$, $5p^5 5d^4 6s^2 6p$, $5p^4 5d^6 6s^2$, $5p^4 5d^7 6s$, $5p^4 5d^8$, $5p^4 5d^6 6s6p$, $5p^4 5d^7 6p$, $5p^4 5d^5 6s^2 6p$, $5p^4 5d^6 6s^2$, $5p^4 5d^7 6s$, $5p^4 5d^8$。由于这些组态规模较大，FAC 计算采用并行方式，在 ANTYA 的 IPR Linux集群上使用 32 个 CPU 核心执行，以获得电子碰撞激发截面。FAC 得出的组态和能级列于表1中。该表还列出了美国国家标准与技术研究院的能级 [28] 以及 Duck-Hee Kwon 等人报告的其他方法所得结果 [15]。与美国国家标准与技术研究院的能量相比，本研究所得能量值总体上吻合良好，尤其是较低能级，偏差相对较小。对于若干激发组态，差异有所增大。类似地，GRASP [14] 计算结果与美国国家标准与技术研究院的能量值最大相差 39%。值得一提的是，进一步纳入更多态并未显著改善能级。最后，将能级修正为相应的美国国家标准与技术研究院 [28] 数值，以计算电子碰撞激发截面。

在 RDW框架中，电子碰撞激发截面主要受宇称和角动量选择定则支配。当 $\Delta J = 0, \pm 1$ $(0 \not\to 0)$，且初态和末态具有相反宇称时，散射振幅中的直接（偶极允许 $E1$）部分会产生贡献，从而形成较大的截面；随着电子能量 E 增加，截面缓慢下降。当不存在这种$E1$耦合时（禁戒 ΔJ 或宇称相同），激发通过交换作用和高多极相互作用发生，因此峰值较小，且在高能区下降更快。因此，对于允许和禁戒跃迁，$\sigma(E)$ 都会在阈值附近迅速上升，并随 E 增加而逐渐下降。模拟研究了从中性钨的基态和六个长寿命亚稳态到 $5d^4 6s(^6D)6p$ 和 $5d^5(^6S)6p$组态的精细结构能级的跃迁，入射电子能量最高为 500 电子伏特。图 1–6 概述了这些结果：图 1(a)–(d) 展示了从 $5d^4 6s^2, {}^5D_0$ 基态出发的激发截面。类似地，图 2–6 分别给出了从其他亚稳初态（$5d^5(^6S)6s, {}^7S_3$, $5d^4 6s^2, {}^5D_1$,2,3,4，以及 $5d^4 6s^2$, ${}^3P_0$）出发的详细截面结果。下文讨论了中性钨基态和亚稳态的各个跃迁的激发截面。

3.1 从基态（$5d^4 6s^2, {}^5D_0$）出发的激发

从 D_0 基态项（$J_i = 0$）出发，只有跃迁至满足 $J_f = 1$ 的奇宇称能级，才符合$\Delta J = 0, \pm 1$ 偶极选择定则（因为 $0 \to 0$ 是禁戒的）。事实上，如图1(a)所示，从 ${}^5D_0$ 出发的最大截面对应于激发至 $5d^4 6s6p$ 能级 ${}^5D_1^\circ$ 和 ${}^7D_1^\circ$。这两个能级的能量分别为3.444电子伏特和2.659电子伏特，它们与 ${}^5D_0$ 基态具有有利的角动量耦合，因此产生了非常大的近阈值截面，其量级为 $\times 10^{-17}$ cm^2，如图1(a)所示。图1(a)还显示，激发至 ${}^7F_1^\circ$、 ${}^5F_1^\circ$和 ${}^5P_1^\circ$等能级时，截面仍然较高，量级为 10^{-17} cm^2。尽管这些通道弱于主要通道，但仍具有重要意义，尤其是在电子能量分布较宽的等离子体中。在这一组能级中，截面随 J变化呈现明显的依赖关系。在 ${}^7F^\circ$项的五个精细结构能级中，$J = 1$ 能级（${}^7F_1^\circ$）的激发截面相对较大，且随入射电子能量增加而下降得更缓慢。相比之下，较高-J的能级，即 ${}^7F_2^\circ$、${}^7F_3^\circ$和 ${}^7F_4^\circ$，截面相对较小；其中 ${}^7F_2^\circ$和 ${}^7F_4^\circ$的截面尤其会随入射能量增加而更快下降（见图1(b)和(d)）。如图1(c)和(d)所示，激发至 $5d^5$（^6S）$6p$（${}^7P_2^\circ$,3,4）能级的截面峰值分别为 2.5×10^{-19} cm^2、 5.7×10^{-19} cm^2,和 7.3×10^{-20} cm^2，对应于 ${}^7P_2^\circ$、 ${}^7P_3^\circ$和 ${}^7P_4^\circ$能级。对于 ${}^7P_2^\circ$和 ${}^7P_4^\circ$能级，截面随入射电子能量 E增加而迅速下降；而 ${}^7P_3^\circ$ 能级（图1(c)中的蓝色虚线）的截面下降则相对缓慢。

3.2 亚稳态激发 $5d^4 6s^2, {}^5D_1$

对于第一个激发五重态能级 $5d6s,\ {}^5D_1$（$J_i = 1$），强电偶极允许跃迁的数量更多，因为 $J_i = 1$ 允许 $\Delta J = 0$ 以及 $\Delta J = \pm 1$ （不同于 $J_i = 0$ 基态）。如图 2(a)-(d)所示，从 ${}^5D_1$ 出发的若干激发通道具有很大的截面。其中，跃迁至 ${}^7D_1^\circ$ 和 ${}^5D_1^\circ$ 的跃迁截面峰值约为 $\times 10^{-17}$ cm^2，且保持相对较大，并随入射能量增加而缓慢下降，如图 2(a)所示。此外，这些跃迁

表1：中性钨跃迁的组态和上能级，采用 FAC、HFR [31], GRASP[14], MDFGME [15]以及美国国家标准与技术研究院 [28] 基于实验的推荐值。

No.	能级	能量（电子伏特）						
		FAC	NIST	HFR	GRASP	$MDFGME_1$	$MDFGME_2$	$MDFGME_3$
1	$5d^46s^2$ ($^5D_0$)	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
2	$5d^46s^2$ ($^5D_1$)	0.16454	0.20709	0.22130	0.12735	0.14639	0.15387	0.17717
3	$5d^5(^6S)6s$ ($^7S_3$)	0.15951	0.36591	0.36958	0.40587	0.0748	0.15495	0.34489
4	$5d^46s^2$ ($^5D_2$)	0.35509	0.41231	0.43009	0.29280	0.32367	0.33375	0.36664
5	$5d^46s^2$ ($^5D_3$)	0.54942	0.59884	0.61073	0.47308	0.54982	0.54943	0.64061
6	$5d^46s^2$ ($^5D_4$)	0.74887	0.77110	0.76942	0.66343	0.69367	0.70692	0.74369
7	$5d^46s^2$ ($^3P_0$)	1.26816	1.18133	1.19170	1.39285	1.37648	1.35536	1.27808
8	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7F^\circ_0$)	1.39638	2.40398	2.41469	2.11152	2.09097	2.58115	2.49842
9	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7F^\circ_1$)	1.47580	2.48766	2.50344	2.18512	2.16591	2.65574	2.57997
10	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7F^\circ_2$)	1.61919	2.65931	2.66145	2.31955	2.2991	2.78887	2.72272
11	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7F^\circ_3$)	1.80328	2.85750	2.85530	2.50105	2.47404	2.96369	2.90491
12	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7F^\circ_4$)	2.01916	3.07027	3.07438	2.72406	2.68417	3.17366	3.11951
13	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7F^\circ_5$)	2.24793	3.30746	3.00176	2.93583	3.42526	3.37372	0.6
14	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7D^\circ_1$)	1.71201	2.65995	2.67250	2.43030	2.49521	2.98051	2.87602
15	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7D^\circ_2$)	1.97813	2.97124	2.98292	2.63331	2.74053	3.22691	3.15133
16	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7D^\circ_3$)	2.23309	3.24705	3.26343	2.82352	2.95241	3.44373	3.391
17	$5d^46s(^6D)6p$ ($^7D^\circ_4$)	2.45182	3.57040	3.58466		3.27819	3.81824	3.75869
18	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5F^\circ_1$)	2.61011	3.22156	3.25009	3.21238	3.27574	3.83019	3.7035
19	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5F^\circ_2$)	2.31938	3.42972	3.43357	3.36395	3.36524	3.96014	3.84867
20	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5F^\circ_3$)	2.44405	3.61279	3.62321		3.65538	4.15418	4.04803
21	$5d^5(^6S)6p$ ($^7P^\circ_2$)	3.98058	3.25208	3.25643	2.97101	2.96929	3.54905	3.48621
22	$5d^5(^6S)6p$ ($^7P^\circ_3$)	4.08854	3.40809	3.41889	3.11605	3.11683	3.67771	3.61534
23	$5d^5(^6S)6p$ ($^7P^\circ_4$)	4.45841	3.45788	3.47785	2.98067	3.11479	3.60894	3.56685
24	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5D^\circ_0$)	2.46810	3.30163	3.30933	3.44381	3.33893	3.85507	3.66865
25	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5D^\circ_1$)	3.93839	3.44410	3.45043	3.53756	3.33274	3.89912	3.78748
26	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5D^\circ_2$)	3.18660	3.61982	3.62677		3.44602	4.02916	3.85789
27	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5D^\circ_3$)	2.90356	3.70872					
28	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5P^\circ_1$)	4.17299	3.49622	3.49362	3.30163	3.5016	4.01523	3.84609
29	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5P^\circ_2$)	3.72621	3.64432	3.64581	3.49048	3.51362	4.06788	3.94684
30	$5d^46s(^6D)6p$ ($^5P^\circ_3$)	3.37457	3.79226	3.80527	3.72954	3.73949	4.21803	4.12033

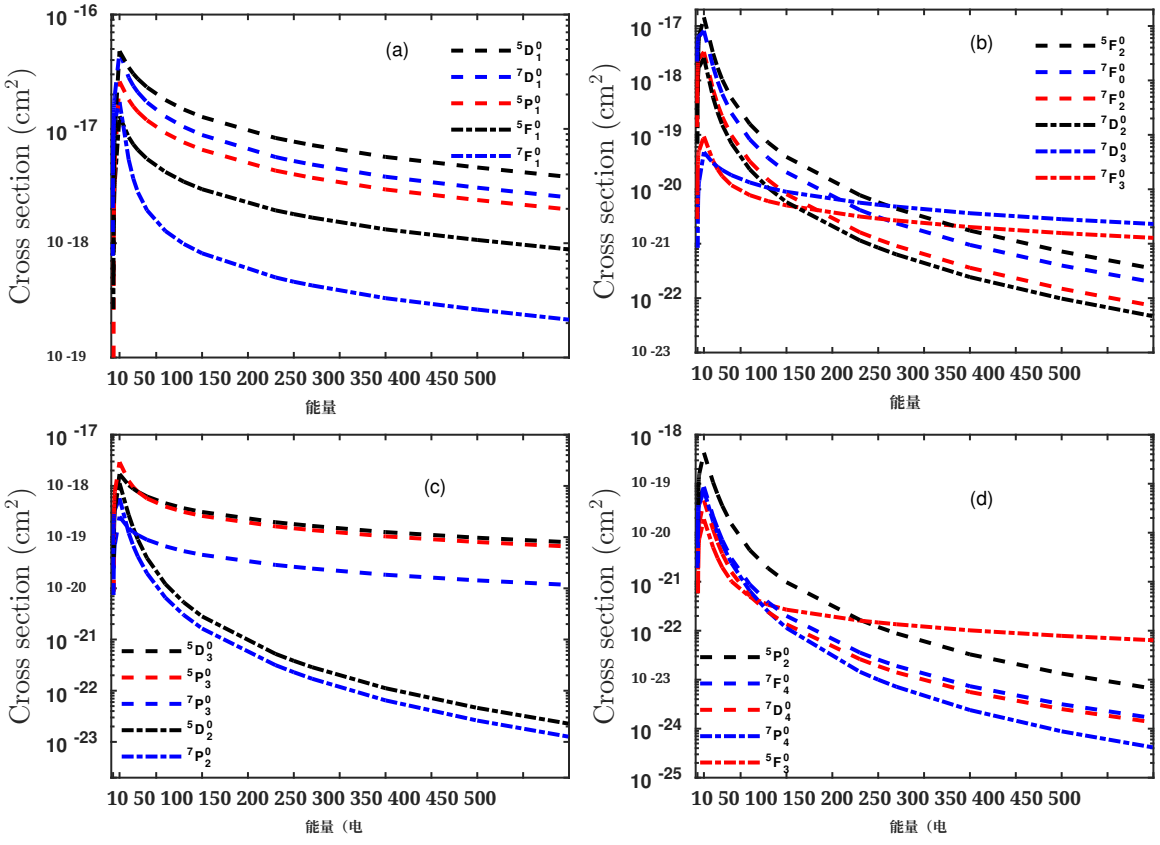

图1：中性钨从基态$5d^46s^2$ ($^5D_0$)到各激发态（a-d）的电子碰撞激发截面。

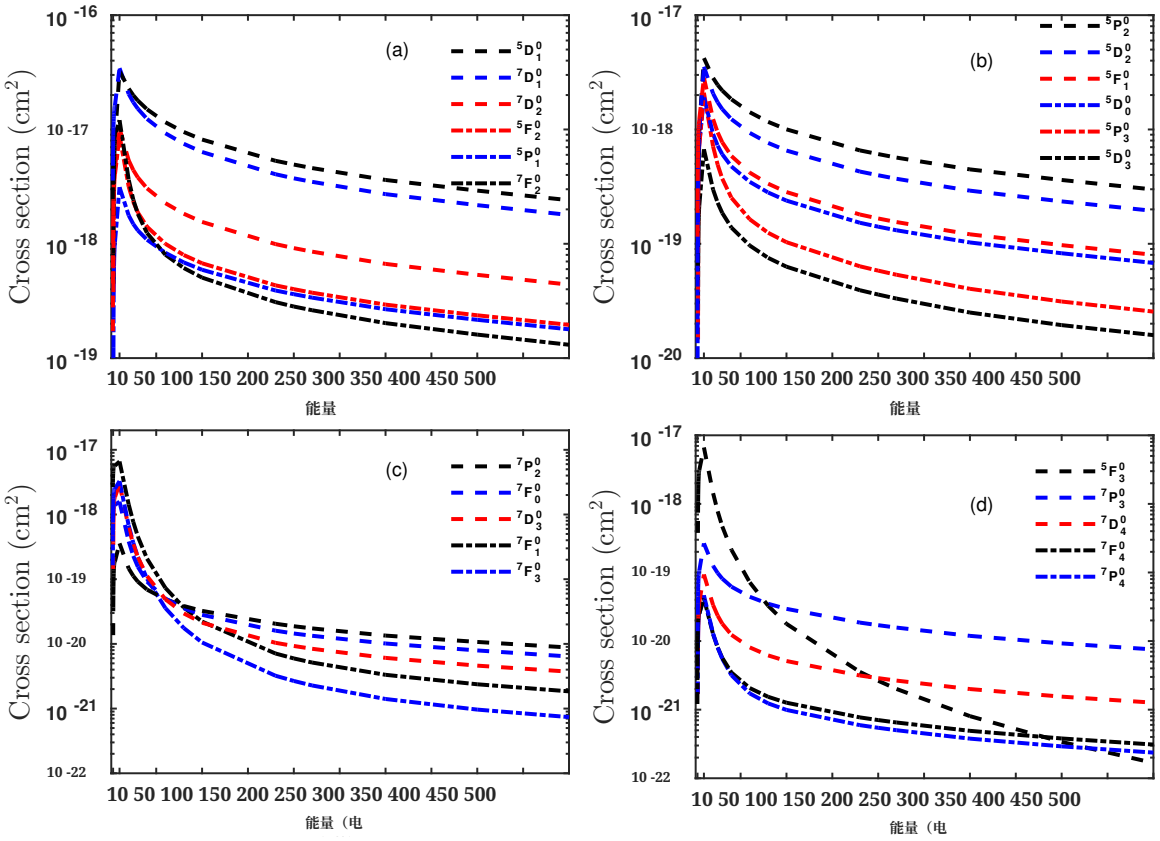

图 2：中性钨从亚稳态 $5d^46s^2$ ($^5D_1$) 到不同激发态的电子碰撞激发截面（分别对应 a–d）。

从 $^5D_1$ 亚稳态到 $^7D_2^\circ$的跃迁中， $^7F_2^\circ$ 具有显著的截面，且随入射能量 E缓慢变化。与 $^5D_0$类似，从 $^5D_1$ 亚稳态到$^7P_2^\circ$,3,4的跃迁截面较低（图 2(c) 和 (d)）。此外，在整个能量范围 E内，激发至 $^7P_2^\circ$（图 2(c) 中的黑色虚线）和 $^7P_3^\circ$（图 2(d) 中的蓝色虚线）的截面相近。图 2(a) 和 (b) 分别显示，激发至 $^5F_2^\circ$、 $^5D_2^\circ$和 $^5P_2^\circ$时，各自旋多重组末态能级的截面相近。在可由 $^5D_1$到达的 $^7F^\circ$ 能级中（图 2(c)），截面在入射能量达到 E 之前遵循 $^7F_1^\circ \gg {}^7F_0^\circ$；当入射能量达到 ~ 50 电子伏特后，$^7F_0^\circ \gg {}^7F_1^\circ$。另一方面，$^7F_2^\circ \gg {}^7F_3^\circ \gg {}^7F_4^\circ$。这表明，精细结构效应仍会调制给定自旋多重组内的强度。与基态 $^5D_0$ 能级相比，从亚稳态 $^5D_1$ 出发、跃迁至 $^7P_4^\circ$、 $^7D_4^\circ$和 $^7F_4^\circ$能级的跃迁，其峰值大小相近，但随着入射电子能量 E增加，截面下降得更为缓慢，如图 1(d) 和 2(d) 所示。

3.3 亚稳态激发 $5d^5(^6S)6s, ^7S_3$

图3(a)-(d)描绘了从高自旋亚稳态 $5d^5(^6S)6s, ^7S_3$($J_i = 3$, $S = 3$)到 $5d^46s6p$ 和 $5d^56p$ ($^7P_2^\circ$,3,4)能级的跃迁截面。由于总自旋更大且角动量更高，这些跃迁呈现出略有不同的激发模式。在$J_i = 3$条件下，大量 $\Delta J = 0$、 ± 1 跃迁是偶极允许的；事实上，几乎所有$J_f = 2$、3或4的末态能级都可通过显著的 $E1$ 跃迁到达。因此，来自 $^7S_3$ 的主导激发群比先前的五重态情形更宽。到 $^7P_4^\circ$ 跃迁的截面在阈值附近具有最大量级，约为 7×10^{-16} cm^2 ，并如图3(a)所示随入射能量缓慢下降。这是因为激发源于强偶极允许价电子跃迁（$\Delta S = 0$、 $\Delta J = +1$，甚至到奇宇称跃迁），其中$5d^5$ 实充当旁观者，从而产生较大的径向重叠。在 ^{7}多重态末态中，$^7P_2^\circ$、3、4和 $^7D_4^\circ$主导其他态，并在较高入射能量处呈现长而平坦的尾部。此外，如图3(a)所示的通道 $^5F_2^\circ$和 $^5F_3^\circ$产生更大的截面，在阈值附近各自约为一个数量级 $\sim 2 \times 10^{-16}$cm^2。还观察到， $^7S_3$到 $^7F^\circ$、 $^7D^\circ$和 $^7P^\circ$的激发截面表现出明显的统计（$2J_f + 1$）依赖性，较高J的精细结构分量系统地显示出更大的截面。对 $^7S_3$ 到也注意到类似行为

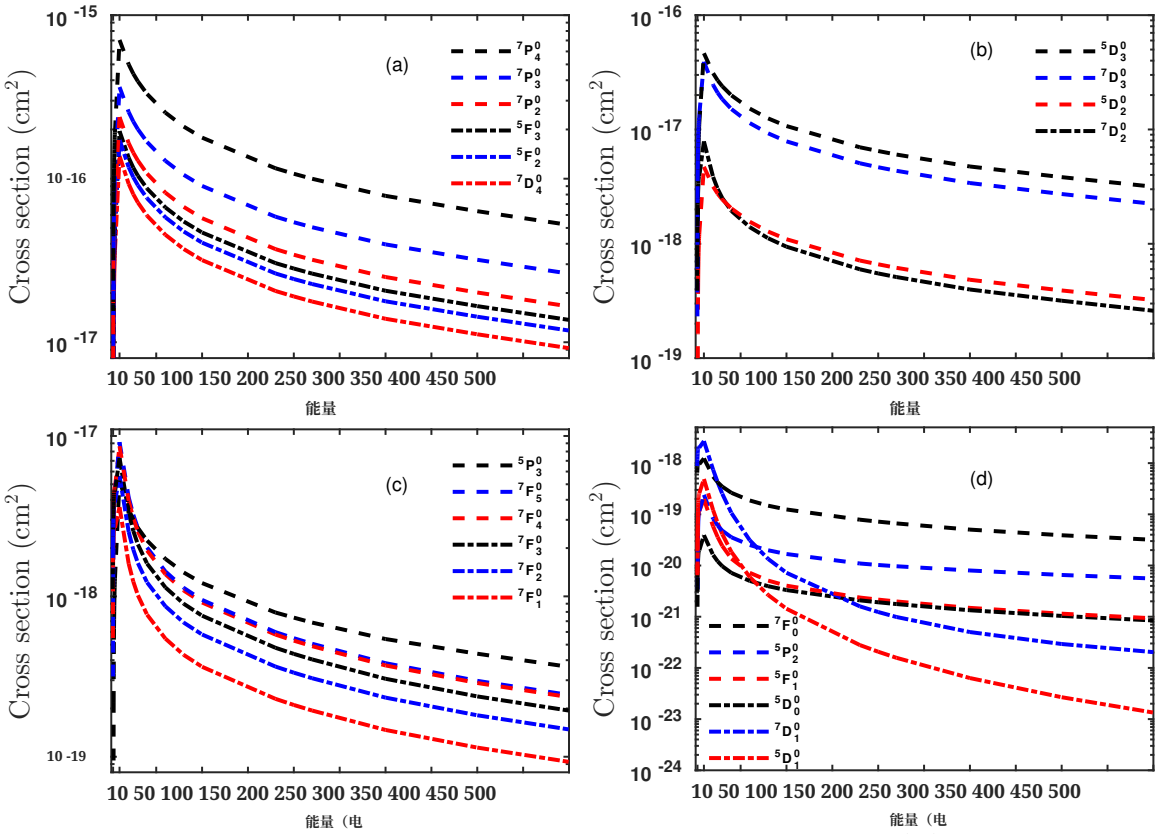

图 3：从亚稳态 5d^{5}6s (^{7}S$_3$) 到不同激发态的中性钨电子碰撞激发截面（a-d）。

^{5}多重态跃迁。相对于前文讨论的五重态初态，$^7S_3$ 亚稳态呈现出略有不同的截面层级。值得注意的是，钨中的自旋-轨道混合强烈增强了若干 ^{5}多重态末态通道（例如 $^5F_2^\circ$和 $^5F_3^\circ$），使其与 ^{7}多重态通道同样重要。包含 $^5D^\circ$ 通道的图3(b)和(d)对 $^5D_3^\circ$ 显示出更大的截面，峰值量级为4.6$\times$ 10^{-17} cm^2。如图3(d)所示，仅到 $^5D_0^\circ$、$^5D_1^\circ$、 $^5F_1^\circ$和 $^7D_1^\circ$ 的跃迁截面较低，而其余跃迁则产生显著的激发截面。总体而言，$^7S_3$ 的振幅分布比例如 $^5D_1$的更宽。更多通道可被视为强通道，这意味着来自 $^7S_3$ 的激发强度分布在 ^{7} 和 ^{5} 系列能级上，而不是仅集中于少数谱线。需要指出的是，从 $^5D_1$ 到 $5d^5 6p$ 态的跃迁（对应于$^7P_2$、3、4）相对于来自 $^7S_3$的跃迁具有更低的量级（10^3 或更小）。对于碰撞-辐射建模，$^7S_3$亚稳态预计是进入$^5F_2^\circ$、3、 $^5D_3^\circ$、 $^7P_2^\circ$、3、4和 $^7D_4^\circ$能级的主要馈入源，随后这些能级辐射级联到其他组态。鉴于截面非常大，即使 $^7S_3$能级中只有适度的布居数，也可能显著增强与 $^5F^\circ$和 $^7P^\circ$能级组相关谱线的发射。同时，图3(d)所示的许多较弱通道（例如 $^7D_1^\circ$、 $^7F_0^\circ$、 $^5F_1^\circ$、 $^5D_0^\circ$、1和$^5P_2^\circ$）对净激发速率贡献较小，因此在简化动力学模型中很可能可以省略或合并而不损失精度。然而，必须保留主导的 $^5F^\circ$和 $^7P^\circ$路径，才能正确计入从 $^7S_3$出发的碰撞激发。

3.4 从亚稳态 $5d^4 6s^2, ^5D_2$ 激发

亚稳态 $5d6s,\ \ D_2^4 (J_i^2 \stackrel{5}{=} 2)$产生的激发，其大小与来自 $5d^4 6s^2$，$^5D_1$ ($J_i = 1$)的激发相近。图4(a)–(d)显示，来自 $^5D_2$的最显著跃迁是馈入 $5d^4 6s6p$、 $^5D_1^\circ$、 $^7D_{1,\ 2}^\circ$、 $^7P_3^\circ$和 $^5F_3^\circ$（图4(a)）通道的跃迁。特别是，这些通道是在所考察的所有情形中最强的跃迁，其峰值约为 $\sim 1-3\times 10^{-17}$ cm^2，并在整个0–500电子伏特范围内保持主导地位。图4(b)显示了 $^7F_3^\circ$、 $^5P_{2,\ 3}^\circ$、 $^5F_2^\circ$和$^5D_{2,\ 3}^\circ$能级的激发截面。除 $^7F_3^\circ$外，大多数跃迁的峰值截面约为 $\sim$ 4–8 $\times$ 10^{-18} cm^2； $^7F_3^\circ$的峰值截面相对较大，约为 $\sim 10^{-17}$ cm^2, , 并随入射电子能量 E的增加而逐渐减小。 $^7F_3^\circ$ 通道的激发截面在大小上与

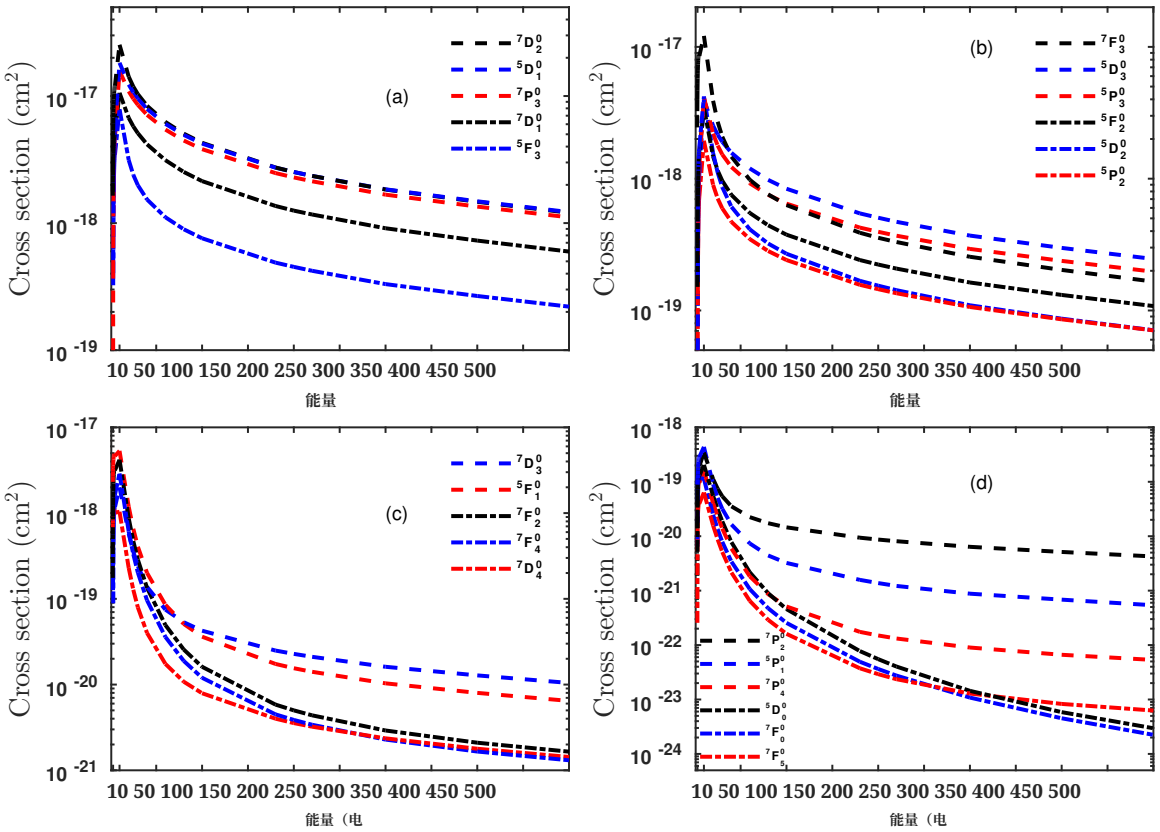

图 4：中性钨从亚稳态 5d^{4}6s^2 (^{5}D$_2$) 到各激发态（a-d）的电子碰撞激发截面。

图4（a）中所示的主导通道相当。到 $^5F^\circ$ 态的激发截面呈现统计（$2J_f+1$）依赖性，J较高的精细结构分量显示出系统性更大的截面（$^5F_3^\circ \gg {}^5F_2^\circ \gg {}^5F_1^\circ$），如图4（a）、（b）和（c）所示。如图4（c）所示，$^7F_2^\circ$、$^7F_4^\circ$和$^7D_4^\circ$虽然峰值较大，但会随入射电子能量 E的增加而急剧减小。图4（d）显示，类似 $^7F_0^\circ$、$^7F_5^\circ$和 $^5D_0^\circ$的能级受到更强抑制，其截面在能量标度的高端降至 10^{-24} cm^2 范围。这些弱跃迁贡献很小，在大多数实际分析中可以安全地忽略，但为确保完整性除外。

与较低的 J 情形相比，$^5D_2$ 态中的 $^5D_2$ 亚稳态对 ^{7} 多重态末态的激发强度与 $^5D_1$ 态相当。相反，将五重态 $^5D_2$ 态（$S=2$）与上文讨论的七重态初态 $^7S_3$ （$S=3$）进行比较时，可以发现，在 $^5D_2$ 情形下，大多数激发通道的截面略低。

3.5 从亚稳态激发 $5d^4 6s^2, {}^5D_3$

对于亚稳态 5d6s、 D_3^4 （$J_i^5=3$），总体行为延续了 $^5D_2$中所见的趋势。随着J_i 增大，更多末态能级满足 $\Delta J=0$、±1，而且 $^5D_3$ 确实具有众多强偶极允许通道。其中最主要的是 $^5D_3^\circ$ 通道，如图5(a)所示。如图5(a)所示，向 $^7F_4^\circ$ 能级的跃迁显示出与向 $^7D_2^\circ$和$^7D_3^\circ$跃迁相似的峰值截面。图5(b)中向 $^7P_3^\circ$和 $^7P_4^\circ$的跃迁具有相当的数量级，类似于先前的通道 $^7D_2^\circ$和 $^7D_3^\circ$，在0–500电子伏特的入射电子能量范围内呈逐渐下降。还注意到，图5(b)中的 $^5P_3^\circ$ 能级表现出的截面范围为6.0×10^{-18} cm^2 至 8.4× 10^{-20} cm^2。图5(c)表明，诸如 $^7F_3^\circ$、$^5D_2^\circ$等通道给出的峰值量级为 $\sim 4\times 10^{-18}$ cm^2，并随入射电子能量迅速下降。此外，$^7F^\circ$ 项精细结构分量之间激发截面的分布遵循统计（$2J_f+1$）依赖关系，导致除 $^7F_0^\circ$外，截面随J增大而逐渐增大。如图5(d)所示，当入射电子能量超过 $E\geq 50$ 电子伏特时，来自 $^7F_0^\circ$的激发截面高于 $^7F_1^\circ$。对于 ^{5}多重态跃迁也可见类似行为：当入射电子能量超过 ~ 50 电子伏特时，来自 $^5P_1^\circ$和 $^5D_0^\circ$的激发截面大于 $^5P_2^\circ$和 $^5D_1^\circ$。有趣的是，图5(b)显示 $^7P_3^\circ$ 和 $^7P_4^\circ$ 精细结构能级在整个入射电子能量 E范围内具有几乎相同的截面。

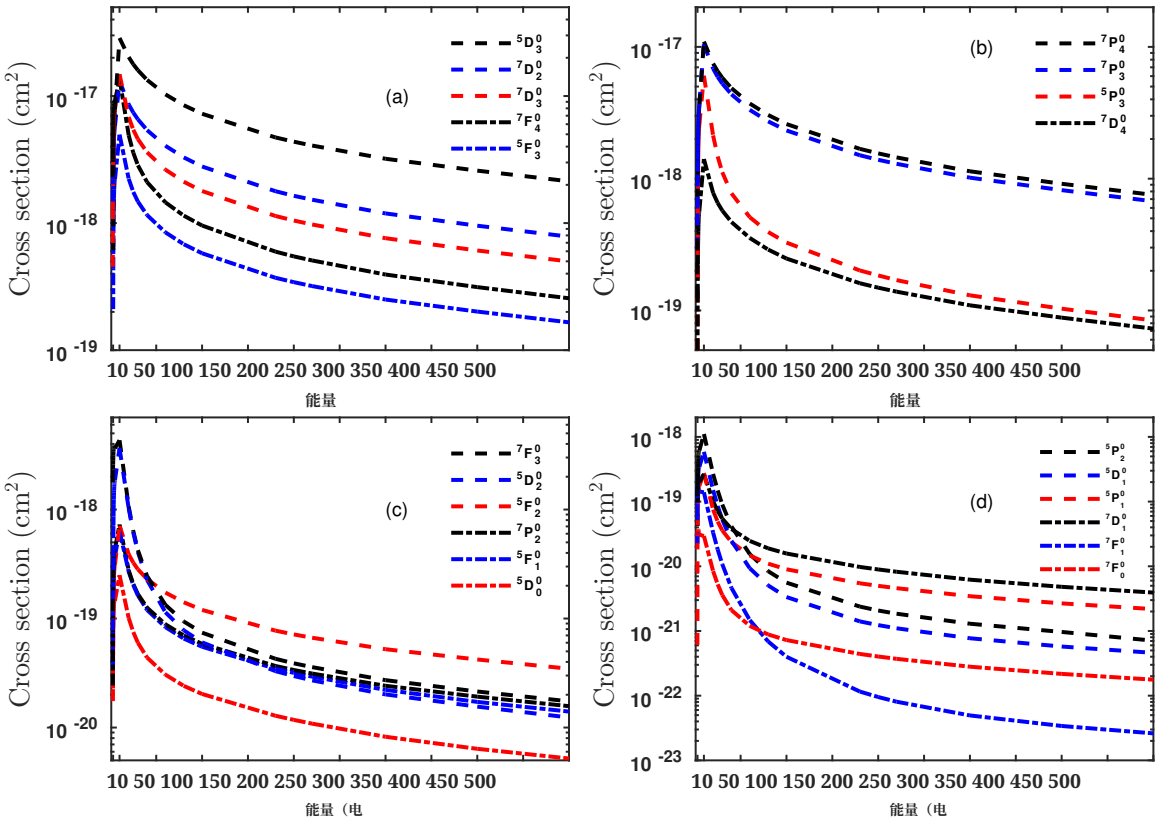

图 5：中性钨从亚稳态 5d^{4}6s^2 (^{5}D$_3$) 到各激发态（a-d）的电子碰撞激发截面。

将 $^5D_3$ 结果与 $^5D_2$ 情形相比较，截面处于相近范围内。 $^7D_2^\circ$ 在 $^5D_2$ 情形下给出最大截面，而 $^5D_3^\circ$ 到 $^5D_3$ 的跃迁是最大的。主要的明显差异在于，对于 $^5D_3$， $^7P_2^\circ$和 $^7P_3^\circ$均显示出相近的量级，而从$^5D_2$ 起，这两条跃迁具有不同的量级。比较 $^5D_3$ 和 $^7S_3$ 的结果，大多数$^7S_3$ 跃迁给出的激发截面高于 $^5D_3$。

从等离子体的角度来看， $^5D_3$ 亚稳态对布居数的贡献方式与其他五重态亚稳态 $^5D_1$ 和 $^5D_2$ 相同，能够有效地为多种激发通道提供粒子。主导通道包括激发至与 $5d^4 6s(^6D)6p$ 组态相关的 $^5D_3^\circ$, $^7D_{2,3}^\circ$, $^7F_4^\circ$能级，以及属于 $5d^5(^6S)6p$ 组态的 $^7P_{3,4}^\circ$能级。这些跃迁显著促进了激发态之间的布居再分布，因此在综合碰撞辐射模型中必不可少。

3.6 亚稳态激发 $5d^4 6s^2, ^5D_4$

最高J 五重态亚稳态 $5d6s$，D_4 ($J_i = 4$)表现出主导激发通道的进一步重新分布。对于 $J_i = 4$，更多末态变为偶极允许（$J_f = 3$、4、5，来自 $\Delta J = \pm 1$、0），并且如图6(a-d)所示，自旋-轨道混合继续发挥重要作用。由图6(a)可见，本相对论扭曲波计算表明，来自 $^5D_4$ 态的最强激发对应于向($5d^4 6s(^6D)6p$) $^5D_3^\circ$能级的跃迁，峰值截面约为 $\sim 4.63\times 10^{-17}$ cm^2。这种增强源于初始 J_i=4 态与具有 $J_f = 3$的末态之间的强偶极耦合。与此同时，向 $5d^4 6s(^6D)6p$ 组态的 $^7F_5^\circ$（图6(a)）能级的跃迁达到约1.49 $\times$ 10^{-17} cm^2 量级的峰值截面，并随入射电子能量 E的增加而缓慢下降。向 $^7D_3^\circ$ 和 $^7D_4^\circ$ 能级的激发达到约8.61 $\times$ 10^{-18} cm^2 量级的峰值截面，但与 $^7D_3^\circ$相比，向 $^7D_4^\circ$ 的激发随入射电子能量 E 的增加而迅速下降。尽管这些跃迁涉及七重态（$S = 3$），意味着相对于初始五重态（$S = 2$）存在名义上的自旋变化，但它们仍可通过交换耦合和强组态混合被有效激发，而这正是钨中众所周知的特征。如图6(a-d)所示， $^7F^\circ$、 $^7P^\circ$和 $^5D^\circ$能级组的激发截面随总角动量 J的增大而增大，表明较高J 精细结构能级被优先布居。相比之下，来自 $^5D_4$ 态的其他激发通道，例如向$^7F_0^\circ$、1、2和$^5D_0^\circ$、1能级的跃迁，

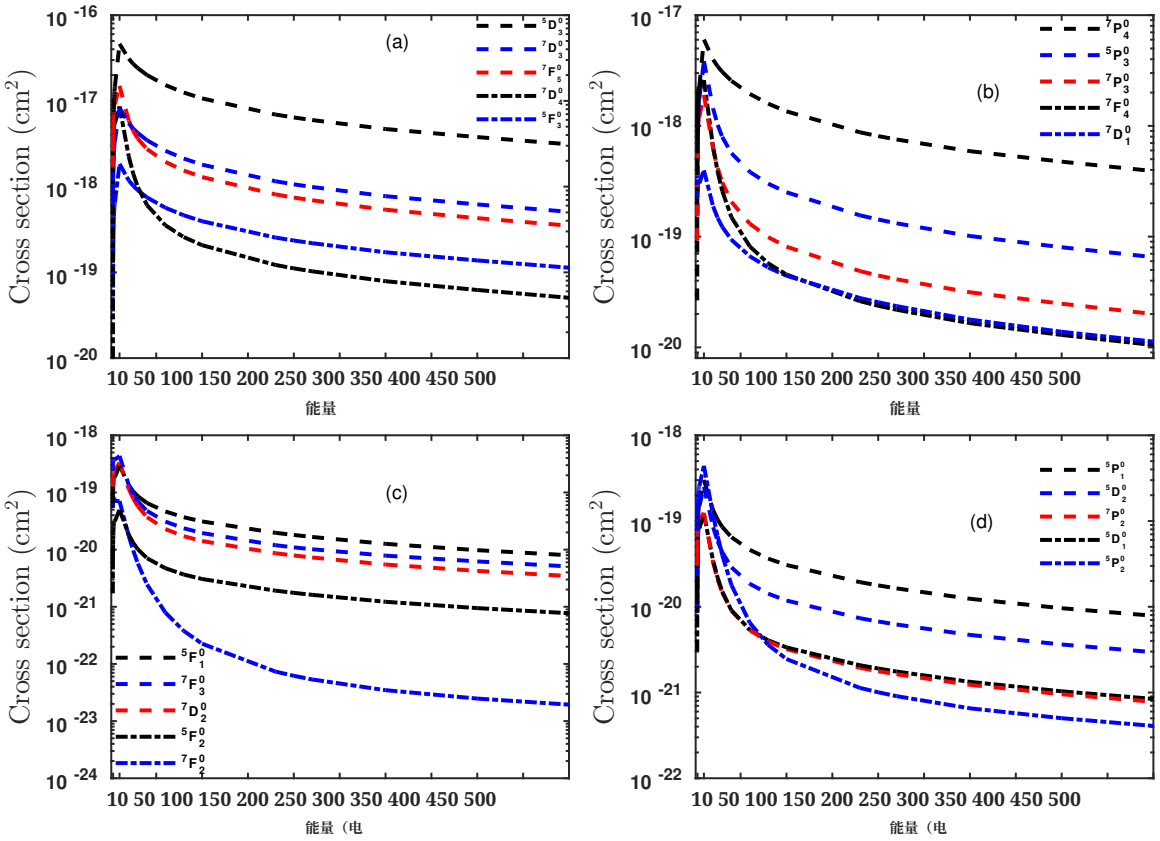

图 6：中性钨从亚稳态 5d^{4}6s^2 (^{5}D$_4$) 到的电子碰撞激发截面各种激发态（a-d）。

表现出相当小的截面，其中一些随入射电子能量的增加而迅速下降。由于截面量级极低，其中一些较弱跃迁未在本图中绘出。总体而言，结果表明较高的J $^7D^\circ$、 $^7F^\circ$和 $^5D^\circ$末态由 $^5D_4$ 能级显著布居，而这些项中较低的 J 成员则相对较弱。一般而言，源自$^5D_4$ 能级的总激发截面在量级上与其他五重态亚稳态相近。

3.7 亚稳态激发 $5d^46s^2,{}^3P_0$

最后，图 7(a-d) 展示了亚稳态 ^{3} $5d6s$，P_0 ($J_i = 0, S = 1$)。与上文讨论的五重态和七重态相比，这个三重态的总自旋低得多，因此耦合行为也显著不同。总体而言，来自 $^3P_0$ 的绝对截面与其他五重态相似，但各通道之间仍存在明显的强度层级。图 7(a) 显示，从 $^3P_0$ 出发，最强的跃迁是激发至 $5d^46s6p\ {}^5F_1^\circ$ 能级。该通道受益于交换驱动耦合，峰值约为 4×10^{-17} cm^2。与大多数其他 $^3P_0$ 通道相比， $\sigma(^3P_0 \to {}^5F_1^\circ)$跃迁随 E 缓慢下降，因此 $^5F_1^\circ$ 在较高能量下仍保持主导影响。其次重要的通道是激发至 $^5D_1^\circ$, $^5P_1^\circ$ ，其峰值接近 10^{-17} cm^2 ，随能量 E同样呈现逐渐下降的趋势。这三个通道（$^5F_1^\circ$, $^5P_1^\circ$和 $^5D_1^\circ$）显然是从 $^3P_0$ 亚稳态出发的主要激发路径。除此之外，一个七重态通道（$^7D_1^\circ$）和两个五重态通道 $^5P_2^\circ$, $^5D_2^\circ$具有中等强度；如图 7(a) 和 7(b) 所示，相应跃迁的峰值分别约为 $\sim$ 2-3 $\times$ 10^{-18} cm^2 。在相当宽的能量范围内， $^7D_1^\circ$ 通道仍保持中等强度，这表明即使初态为三重态，也有一定能力（或许通过交换作用和混合）激发较高自旋的末态，不过其效率远低于高自旋初态。另一方面，从 $^3P_0$ 出发的大多数其他跃迁都受到显著抑制。例如，激发至 $^7F_0^\circ$, $^7F_2^\circ$和 $^7F_4^\circ$能级以及至 $^7P_4^\circ$的激发，如图 7(c) 和 7(d) 所示。这些通道涉及 $\Delta J = 0(0 \to 0)$、2 和 4；这些跃迁对于直接偶极跃迁是禁戒的，必须通过高阶多极跃迁实现，并且还需要将低自旋初态耦合至特定的高自旋末态，因此概率极低。总之， $^3P_0$ 初态主要布居五重态流形，尤其是 $^5P_1^\circ$, $^5D_1^\circ$和 $^5F_1^\circ$项。

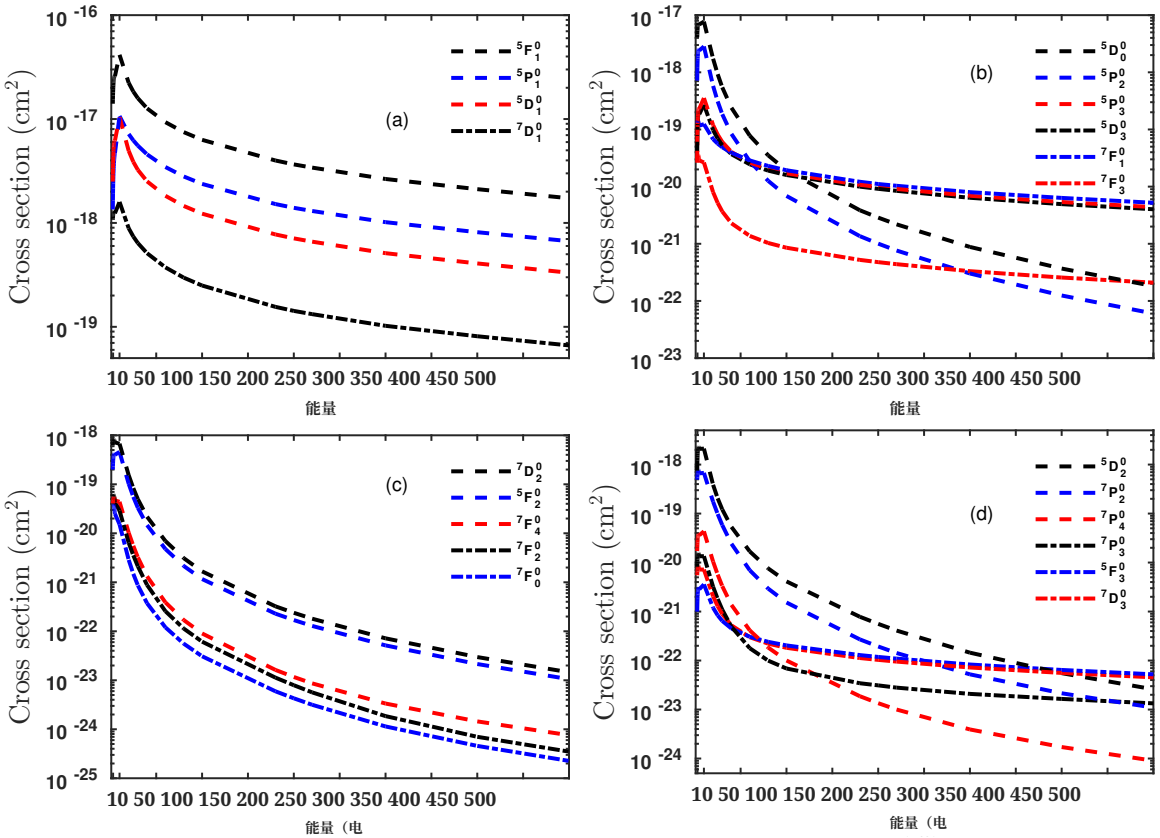

图 7：中性钨从亚稳态 5d^{4}6s^2 (^{3}P$_0$) 到的电子碰撞激发截面
各种 激发态（a-d）。

对于所有初态（基态 $^5D_0$ 以及六个亚稳态能级 $^5D_{1,\ 2,\ 3,\ 4}$, $^7S_3$ 和 $^3P_0$），计算得到的激发截面均呈现由选择定则支配的相同基本物理行为。每种情况下，最大的截面都对应于电偶极允许的跃迁（宇称相反且 $\Delta J = 0,\ \pm 1$）或仅弱禁戒的跃迁；而需要高阶多极跃迁或自旋翻转的跃迁则较弱。众多强通道的存在表明，从 $^7S_3$ 态出发的激发广泛分布于 ^{7} 和 ^{5} 系列能级，而非集中在少数跃迁上。

此外，我们对选定的跃迁波长进行了辐射跃迁概率评估，并将结果列于表2中。表2列出了特定跃迁的辐射跃迁概率，以及基于实验的 HFR [31], GRASP [14], MDFGME [15] 和美国国家标准与技术研究院 [28] 推荐值。从表2可以看出，FAC获得的辐射跃迁概率与美国国家标准与技术研究院、HFR和MDFGME$_3$ 的结果吻合较好；对于若干跃迁，其数值通常处于同一数量级。尽管若干跃迁与美国国家标准与技术研究院的结果吻合良好，但其他跃迁仍存在明显偏差。这些偏差可能源于中性钨（W I）中强烈的组态相互作用和高度复杂的原子结构。因此，还需要开展进一步的理论研究，并进行专门的实验测量，以提高 W I跃迁辐射跃迁概率的可靠性。此外，计算得到的相对论扭曲波截面给出至入射电子能量500电子伏特，而通过 R矩阵计算获得的碰撞强度 [14] 则给出至30电子伏特，涉及四个特定跃迁： $5d^46s6p\ ^7P^\circ_4$ 至$5d^56s\ ^7S_3$（400.88纳米）、 $5d^46s6p\ ^7F^\circ_5$至 $5d^46s^2\ ^5D_4$（488.69纳米）、 $5d^46s6p\ ^7F^\circ_1$至 $5d^46s^2\ ^5D_0$（498.26纳米）以及 $5d^46s6p\ ^7D^\circ_2$ 至 $5d^46s^2\ ^5D_3$（522.47纳米）。为便于比较，图8绘出了FAC和 R 矩阵 [14]对应于这四个跃迁的碰撞强度。可以观察到，对于跃迁波长400.88纳米、488.69纳米和498.26纳米，FAC得到的碰撞强度与 R 矩阵计算结果存在差异。然而，对于跃迁波长522.47纳米，两组结果完全重合，如图8中的品红色线所示。这两组结果之间的差异可归因于相对论扭曲波理论的微扰性质，其精度在阈值能区附近受到限制。

表2：中性钨跃迁的辐射跃迁速率 (s^{-1})，分别来自 FAC、HFR [31]，GRASP [14],MDFGME [15] 以及美国国家标准与技术研究院 [28] 根据实验得出的推荐值。

波长。	跃迁。	A_{ij} (s^{-1})						
(nm)	j→ i	FAC	NIST	HFR	GRASP	$MDFGME_1$	$MDFGME_2$	$MDFGME_3$
354.52	28-1	1.68E+06	3.20E+06	2.49E+06		6.44E+05	6.16E+05	7.85E+05
376.84	28-2	3.88E+05	3.47E+06	3.08E+06	2.20E+07	2.93E+05	6.60E+05	1.01E+06
381.74	20-3	3.64E+07	3.10E+06					
383.51	29-4	1.38E+05	5.20E+06	6.48E+06	2.63E+07	2.71E+06	1.74E+06	3.28E+06
384.62	19-2	2.31E+05	2.14E+06	2.12E+06	1.46E+07	5.74E+05	1.94E+03	4.54E+05
386.79	17-3	1.28E+07	4.60E+06					
388.14	30-5	9.43E+04	3.60e+06					
400.87	23-3	6.82E+07	1.63E+07	1.83E+07	1.14E+07	2.54E+07	2.34E+07	2.41E+07
404.56	19-3	2.64E+07	2.88E+06	2.78E+06		4.32E+05	1.76E+05	3.41E+05
407.44	22-3	4.19E+07	1.00E+07	9.71E+06	5.66E+06	1.82E+07	1.60E+07	1.82E+07
410.27	30-6	8.11E+04	4.90E+06	4.54E+06	5.39E+06	6.63E+05	4.40E+06	4.51E+06
413.75	22-4	1.21E+06	8.40E+05					
429.46	29-3	3.08E+07	1.24E+07	1.22E+07	3.17E+07	2.45E+07	2.14E+07	2.37E+07
430.21	16-3	2.76E+06	3.60E+06	4.04E+06	4.56E+06	9.06E+06	8.68E+06	8.11E+06
465.99	14-1	8.39E+05	1.00E+06	1.24E+06		9.28E+05	1.07E+06	1.01E+06
468.05	16-5	4.64E+05	1.40E+06	2.40E+06		4.82E+06	7.02E+05	7.23E+05
484.38	15-4	1.04E+06	1.90E+06	2.92E+06		1.06E+06	1.29E+06	1.28E+06
488.69	13-6	2.11E+05	8.10E+05	1.69E+06	1.48E+06	2.20E+05	3.01E+05	3.13E+05
498.26	9-1	4.82E+04	4.17E+05	1.07E+06	2.13E+05	5.53E+04	8.84E+04	1.05E+05
500.61	16-6	5.11E+05	1.20E+06	1.66E+06		5.02E+05	6.88E+05	6.87E+05
505.33	14-2	1.36E+06	1.90E+06	2.51E+06	3.24E+06	1.35E+06	1.70E+06	1.64E+06
522.47	15-5	7.45E+05	1.20E+06	1.64E+06	1.23E+06	8.34E+04	9.44E+05	9.04E+05
535.44	28-7	1.45E+05	1.00E+05					
539.10	12-6	3.41E+03	8.90E+03					
551.47	14-4	5.75E+05	7.30E+05	9.97E+05		5.21E+05	7.29E+05	7.04E+05

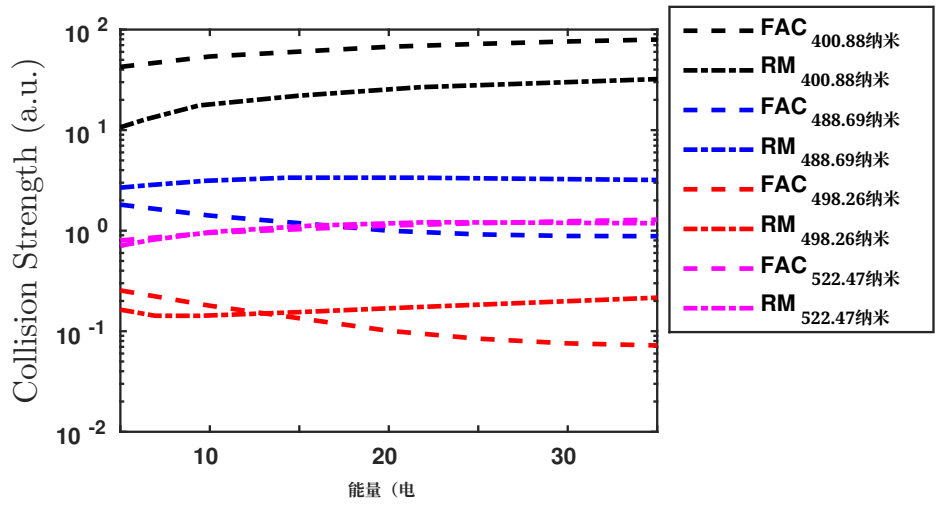

图8：对于 $5d^46s6p\ ^7P_4^\circ$-$5d^56s\ ^7S_3$(400.88纳米)、 $5d^46s6p\ ^7F_5^\circ$-$5d^46s^2\ ^5D_4$(488.69纳米)、 $5d^46s6p\ ^7F_1^\circ$-$5d^46s^{25}D_0$ (498.26纳米)和 $5d^46s6p\ ^7D_2^\circ$-$5d^46s^2\ ^5D_3$ (522.47纳米)跃迁，使用FAC计算得到的碰撞强度和通过R矩阵计算获得的有效碰撞强度分别以虚线和点划线表示。 [14]

4 结论

总之，本文在FAC框架内采用相对论扭曲波方法，系统计算了中性钨（W I）中大量跃迁的精细结构分辨的电子碰撞激发截面。纳入广泛的组态集，确保本计算能够恰当描述价层–价层关联效应和芯层–价层关联效应。计算得到的能级已与HFR、GRASP和MDFGME结果以及美国国家标准与技术研究院（NIST）数据库的推荐值进行了比较。本工作得到的较低能级与NIST数据吻合良好。额外采用低能修正，使近阈值能区的截面能够得到可靠描述。截面已在0-500电子伏特的入射电子能量范围内计算。从基态 $5d^46s^2$ ($^5D_0$)以及选定的亚稳态，即 $5d^46s^2$ ($^5D_{1,2,3,4,}$ $^3P_0$)和$5d^5(^6S)6s$ ($^7S_3$)，到激发组态 $5d^46s(^6D)6p$ 和 $5d^56p$ 的激发强烈依赖于初态。结果表明，从 $5d^56s$ ($^7S_3$)亚稳态出发的激发产生最大的截面，而来自 $5d^46s^2$ 能级的跃迁则显示出相当的量级。这些发现证实，亚稳态对激发能级布居有显著贡献。此外，还评估了若干显著W I跃迁的辐射跃迁概率，并与现有文献数据进行了比较。本FAC结果与其他理论值之间所观察到的差异可归因于中性钨中复杂的组态相互作用效应。总体而言，本工作提供了一套全面且自洽的数据集，有望对涉及钨的等离子体建模和光谱诊断具有重要价值。未来工作将把本原子数据集纳入碰撞–辐射框架，以研究亚稳态布居在决定激发能级布居以及在广泛等离子体条件下所得谱线强度方面的作用。

5 致谢

作者感谢核科学研究委员会（BRNS）、DAE及印度政府通过研究项目拨款（批准编号: 57/14/01/2023/12089）对本工作的支持。本研究中呈现的模拟结果使用 ANTYA（IPR Linux集群）获得。

参考文献

参考文献

[1] R. A. Pitts 等，“ITER 全钨偏滤器：物理问题与设计现状”，《核材料杂志》438，（2013）S48-S56。[2] T. Putterich 等，“ASDEX Upgrade 测得的钨光谱建模及对 ITER 的预测”，Plasma Phys. Control. Fusion 50，（2008）085016。[3] Z. C. Lin 等，“利用轴上电子回旋共振加热，通过X射线晶体光谱学初步观测东方超环中的钨杂质抑制”，Phys. Plasmas 30，（2023）032505。[4] F. Zhang 等，“利用东方超环托卡马克中钨$^{5+}$ 离子的谱线发射评估钨流入率”，Nucl. Fusion 65，（2025）036037。[5] S. Morita 等，“利用日本国立聚变科学研究所的大型螺旋装置和紧凑型电子束离子阱研究钨光谱”，AIP Conf. Proc. 1545，（2013）143。[6] Tetsutarou Oishi 等，“大型螺旋装置中对钨发射光谱的观测，直至 W^{46+} 离子，并对聚变等离子体中高Z杂质输运研究的贡献”，Nucl. Fusion 64，（2024）106011。[7] Alex Thorman 等，“利用欧洲联合环状反应堆电荷交换诊断对高电荷态钨离子进行可见光光谱学研究”，Phys. Scr. 96，（2021）125631。[8] R. Neu 等，“托卡马克等离子体中高电荷态钨离子的X射线光谱观测”，J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30，（1997）5057。[9] I. Beigmann 等，“用于测量等离子体面对部件钨通量的钨光谱学”，Plasma Phys. Control. Fusion 49，（2006）1833。[10] R. Neu 等，“ASDEX Upgrade 中的钨实验”，《核材料杂志》241-243，（1997）678。[11] G.J. van Rooij 等，“全金属装置中的钨偏滤器侵蚀：欧洲联合环状反应堆 ITER类壁的经验”，《核材料杂志》438，（2013）S42-S47。[12] D. Nishijima 等，“钨表面的激光诱导击穿光谱分析”，Phys. Scr. 2016，（2016）014032。[13] C. Shin 等，“基于多条原子谱线确定钨总侵蚀率”，Nucl. Fusion 65，（2025）066027。[14] R. T. Smyth 等，“用于磁约束聚变非侵入式诊断的中性钨电子碰撞激发 Dirac R矩阵计算”，Physical Rev A 97，（2018）052705。[15] Duck-Hee Kwon 和 Paul Indelicato，“用于光谱诊断的中性钨辐射跃迁与电子碰撞跃迁”，Eur. Phys. J. D. 78:86，（2024）。[16] T. Das 等，“类锌至类钴钨离子的 M壳层电子碰撞激发”，Phys. Scr. 86，（2012）035301。[17] Dipti 等，“类镁至类氧钨离子的 L壳层电子激发”，Phys. Scr. 89，（2014）085403。[18] Dipti 等，“类铁 W^{48+} 至类铝 W^{61+} 离子的电子碰撞激发与偏振研究”，《加拿大物理学杂志》8，（2015）888。[19] Priti 等，“钨离子的全相对论电子碰撞激发截面与偏振”，Atoms 3(2)，（2015）53。[20] Dipti 等，“类铁钨离子的电子碰撞激发”，Journal of Atomic, Molecular, Condensate & Nano Physics 3，（2016）89。[21] Priti 等，“类铷至类溴钨离子的电子激发研究及其光子发射偏振”，Eur. Phys. J. D 71:100，（2017）。

[22] Neelam Shukla 等, 《高电荷态钨离子的电子碰撞激发及其连续光子衰变的偏振研究》, Eur. Phys. J. D **73: 109**, （2019）。[23] Neelam Shukla 等, 《类 Se 至类 Ga 钨离子的 N 壳层电子碰撞激发及其后续发射的偏振》, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **222-223**, （2019）247。[24] Arun Goyal 等, 《利用相对论狄拉克原子R矩阵方法研究类氟钨的碰撞激发》, Journal of Atomic, Molecular, Condensate & Nano Physics **2**, （2015）1-14。[25] M. McCann 等, 《用于磁约束等离子体钨光谱学及再沉积测量的 W^{2+} 电子碰撞激发数据》, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.**57**, （2024）235202。[26] Ritu Dey 等, 《面向聚变应用的中性钨发射模拟研究》, Plasma and Fusion Reserach Accepted（2026）。[27] M. F. Gu, 《灵活原子代码》, Can. J. Phys. **86** （2008）675。[28] A. Kramida、Yu. Ralchenko、J. Reader 和 NIST ASD Team（2024）。美国国家标准与技术研究院数据库（版本 5.12）。可访问：https://physics.nist.gov/asd。[29] Ayushi Agrawal 等, 《通过详细的电子碰撞激发截面计算和碰撞辐射模型分析对碘等离子体进行理论研究》, Plasma Sources Sci. Technol. **33**, （2024）115010。[30] D. W*ü*nderlich 等, 《低压氢铯等离子体的碰撞辐射模型及其在负氢离子射频源中的应用》, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **149**, （2014）360。[31] P. Quinet、P. Palmeri、E. Biemont, 《聚变等离子体研究中值得关注的钨原子跃迁光谱数据》, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **44**, （2011）1833。