

# 类锂铝离子“纯原子”弛豫及粒子数布居 的数值计算

沈百飞 徐至展 张文琦

(中国科学院上海光机所, 上海 201800)

**提要** 本文运用碰撞—辐射模型, 在给定的等离子体参数条件下, 计算了“纯原子”弛豫过程及各能级的粒子数布居, 并对计算结果进行了讨论。模型所需的能级结构、跃迁波长、振子强度及跃迁几率等原子参数, 用 Hartree-Fock 自洽场方法计算得到。

**关键词** 类锂铝离子, 碰撞—辐射模型, 软 X 射线激光

## Calculation of “pure atomic” relaxation and population of Li-like Al ions

*Shen Baifei, Xu Zhizhan, Zhang Wenqi*

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai 201800)

**Abstract** With the C-R model, on the condition of given plasma parameters, we calculated the “pure atomic” relaxation and population of Li-like Al ions. The necessary atomic parameters, such as energy levels, wavelengths, oscillating intensities and the probabilities of transitions were calculated with H-F method.

**Key words** Li-like Al ions, C-R model, soft X-ray laser

## 1 引 言

多重电离态离子的性质, 在天体物理、受控核聚变和软 X 射线激光研究中都起着重要作用。软 X 射线激光的研究, 最近几年进展十分迅速<sup>[1~3]</sup>, 为进行软 X 射线激光的深入研究, 获得更短波长、更好相干性、更高效率的软 X 射线激光, 对优化靶设计和辐照条件的需要就显得很迫切, 为此就有必要了解原子的弛豫过程, 并进行各能级粒子数分布及有关跃迁的增益系数、光强等的计算。本文运用碰撞—辐射模型, 在给定的等离子体参数条件下, 进行了计算, 得到了类锂铝离子的“纯原子”弛豫过程, 和各能级上的粒子数布居。其中所需的原子能级、跃迁波长、振子强度、跃迁几率等原子参数是运用 Cowan 原子结构与光谱计算程序<sup>[4]</sup>计算得到的。

## 2 碰撞—辐射模型

处理等离子体问题的平衡模型主要有三种: 日冕模型、热力学平衡模型及碰撞—辐射模

型。在软 X 射线激光研究所感兴趣的密度范围内,采用碰撞—辐射模型是合适的<sup>[5,6]</sup>。

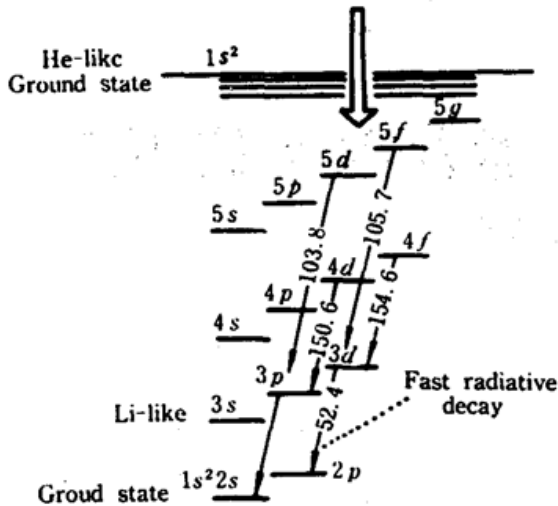


Fig. 1 Schematic diagram of levels of lithium-like aluminum

我们考虑的原子模型(图 1)包括类锂离子  $n = 2 \sim 7$  的 48 个能级和类 He 离子基态,并考虑所有的电偶极跃迁。 $n \geq 8$  的高激发态没有考虑,因为处于高激发态的粒子数不多,并且和我们所感兴趣的激发态的直接耦合也比较弱,而考虑这些高激发态会大大增加问题的复杂性。当然这种取法也有一定的任意性。因为  $n = 6 \sim 7$  的高激发态其电离能很小,假定这些高激发态和类 He 离子基态保持局域热平衡(LTE),也即可用萨哈方程来描述。这样  $n = 6 \sim 7$  的高激发态和类 He 离子基态组成热带。因为基态  $1S^22S$  和两个最低激发态  $1S^22P^2P_{1/2}, 1S^22P^2P_{3/2}$  之间的抽运速率比较大,和自由电子的碰撞也

使这些态之间能迅速交换粒子数,认为这三个态准简并,所以这三个态之间粒子数分布能够保持接近玻尔兹曼分布,而  $1S^22S$  和  $1S^2$  的粒子数分布关系则用改进的萨哈方程描述

$$N(1S^22S) = \delta \frac{N_e}{2} g(1S^22S) \frac{N(1S^2)}{g(1S^2)} \left( \frac{h^2}{2\pi m T_e} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{I}{T_e}\right) \exp\left(-\frac{\Delta E}{T_e}\right) \\ = \frac{\delta}{3.0185 \times 10^{21}} \frac{N(1S^2) N_e}{(T_e)^{3/2}} \exp\left(\frac{I}{T_e}\right) \exp\left(-\frac{\Delta E}{T_e}\right) \quad (1)$$

其中  $\Delta E$  为因周围等离子体影响引起的电离能的减小量,  $g(i)$  为能级  $i$  的统计权重,  $I$  为  $1S^22S$  态的电离能,  $T_e$  为电子温度,单位为电子伏特,  $\delta$  为调节因子,可根据一维流体模型确定,在本文中假定为 1。

由于直接参与电离和复合过程的主要是热带和基态及其简并态(包括碰撞电离、三体复合、双电子复合、辐射复合等机制)。假定在中间束缚态,电离和复合的净值与其它过程(辐射跃迁、电子碰撞激发、电子碰撞退激发)相比,可以忽略。因此,决定中间束缚态粒子数的速率方程可写为

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j>i} N_j A_{ij} + N_e \sum_{j \neq i} \langle \sigma_{j\nu} \rangle - N_i \left[ \sum_{j<i} A_{ij} + N_e \sum \langle \sigma_{i\nu} \rangle \right] \quad (2)$$

其中  $i$  表示从  $1S^23S^2S_{1/2}$  到  $1S^25g^2G_{9/2}$  的各能级,  $j$  为类锂离子的所有能级,  $A_{ij}$  为自发辐射跃迁几率,  $\langle \sigma_{j\nu} \rangle$  为电子碰撞速率系数。

对麦克斯韦速度分布平均的电子碰撞激发率为

$$X_{im} = \frac{1.6 \times 10^{-5} f_{im} \langle g(n, m) \rangle N_e}{\Delta E_{im} \sqrt{T_e}} \exp\left(-\frac{\Delta E_{im}}{T_e}\right) \text{sec}^{-1} \quad (3)$$

由细致平衡可知,电子碰撞退激发率为

$$Y_{im} = \frac{g_m}{g_n} \exp\left(\frac{\Delta E_{im}}{T_e}\right) X_{im} \text{sec}^{-1} \quad (4)$$

其中  $E_i, T_e$  均以电子伏特为单位,  $f_{im}$  为吸收振子强度,  $\langle g(n, m) \rangle$  为热平均的 Gaunt 因子,在  $T_e = 300 \text{ eV}$  时,取为 1。

本文还采用了光性薄近似,禁戒跃迁的影响还未考虑。

### 3 非偶极跃迁的影响

在上面的模型中,只考虑了电偶极跃迁而未计入非偶极跃迁的影响。现在我们以激光下能级  $1s3d$  为例说明电四极跃迁的影响,有关的偶极跃迁为

$$1s3d \quad {}^2D_{3/2} \longrightarrow 1s2p \quad {}^2P_{3/2} \quad \lambda = 5.2388 \text{ nm} \quad Gf = 0.2686 \quad GA = 6.53 \times 10^{11} \text{ sec}^{-1}$$

$$1s3d \quad {}^2D_{5/2} \longrightarrow 1s2p \quad {}^2P_{3/2} \quad \lambda = 5.2373 \text{ nm} \quad Gf = 2.4183 \quad GA = 5.88 \times 10^{12} \text{ sec}^{-1}$$

$$1s3d \quad {}^2D_{3/2} \longrightarrow 1s2p \quad {}^2P_{1/2} \quad \lambda = 5.2230 \text{ nm} \quad Gf = 1.3472 \quad GA = 3.29 \times 10^{12} \text{ sec}^{-1}$$

再看一下比较重要的电四极跃迁

$$1s3d \quad {}^2D_{3/2} \longrightarrow 1s2s \quad {}^2S_{1/2} \quad \lambda = 4.78131 \text{ nm} \quad Gf = 0.0002 \quad GA = 5.12 \times 10^8 \text{ sec}^{-1}$$

$$1s3d \quad {}^2D_{5/2} \longrightarrow 1s2s \quad {}^2S_{1/2} \quad \lambda = 4.78011 \text{ nm} \quad Gf = 0.0003 \quad GA = 7.69 \times 10^8 \text{ sec}^{-1}$$

由(3)式可知,对于  $1s3d-1s2p$  和  $1s3d-1s2s$  两个跃迁,因为  $T_e, N_e$  相同,  $\langle g \rangle, \Delta E_{nm}$  也相近,所不同的是  $f_{mn}$ ,所以,这个跃迁的碰撞激发速率相差有 3 个数量级。再考虑  $1s2p$  和  $1s2s$  两个能级的粒子数分布,假定  $1s2p$  和  $1s2s$  之间满足玻尔兹曼分布,则

$$\frac{P(1s2p)}{P(1s2s)} = e^{-\Delta E/T_e}$$

现在,  $\Delta E = 22 \text{ eV}$ , 假定  $T_e = 40 \text{ eV}$ , 则  $P(1s2p)/P(1s2s) = 0.58$ , 所以  $1s2p$  对  $1s3d$  的影响和  $1s2p$  相比可以肯定小于 1%, 所以对于类锂复合机制, 电四极非偶极激发过程应该可以忽略。

当然,对于类 Ne 的碰撞激发机制,非偶极碰撞过程可能就显得比较重要,这是因为类 Ne 碰撞激发机制的激光上、下能级的主量子数  $n$  相同,也就是说,激光上、下能级的粒子数呈反转,但仍比较接近,这样,即使只有百分之几的影响,也可能影响到激光上、下能级的粒子数反转。而在复合机制中,由于激光上、下能级的主量子数不同,所以就不大可能存在这种情况。

### 4 原子参数的计算

在上面的速率方程中,需要能极结构、振子强度、跃迁几率等原子参数。为此,我们利用 Cowan 原子结构与光谱计算程序<sup>[4]</sup>,用 Hartree-Fock 自洽场方法,计算了原子能极 ( $1S^2nl, n = 2 \sim 7, l = 0 \sim 6$ ) 及电偶极跃迁的光谱性质: 跃迁波长、振子强度、跃迁几率等,计算结果和实验值及已有理论值都能很好符合<sup>[9,10]</sup>。

### 5 结果与讨论

根据上面建立的模型进行了初步计算,得到了在不同等离子体参数条件下,各能级上粒子数分布的“纯原子”弛豫过程(图 2)。其中初值取为: 只有热带和三个最低能态有粒子数分布而中间束缚态上的粒子数为零。计算结果和文献结果比较符合很好<sup>[10]</sup>。在  $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  时,弛豫时间为约 100 ps; 在  $N_e = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  时,弛豫时间为约 20 ps; 在  $N_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  时,弛豫时间为约 10 fs,这表明随着电子密度增加,粒子数分布达到平衡所需的时间逐渐减小,这是因为

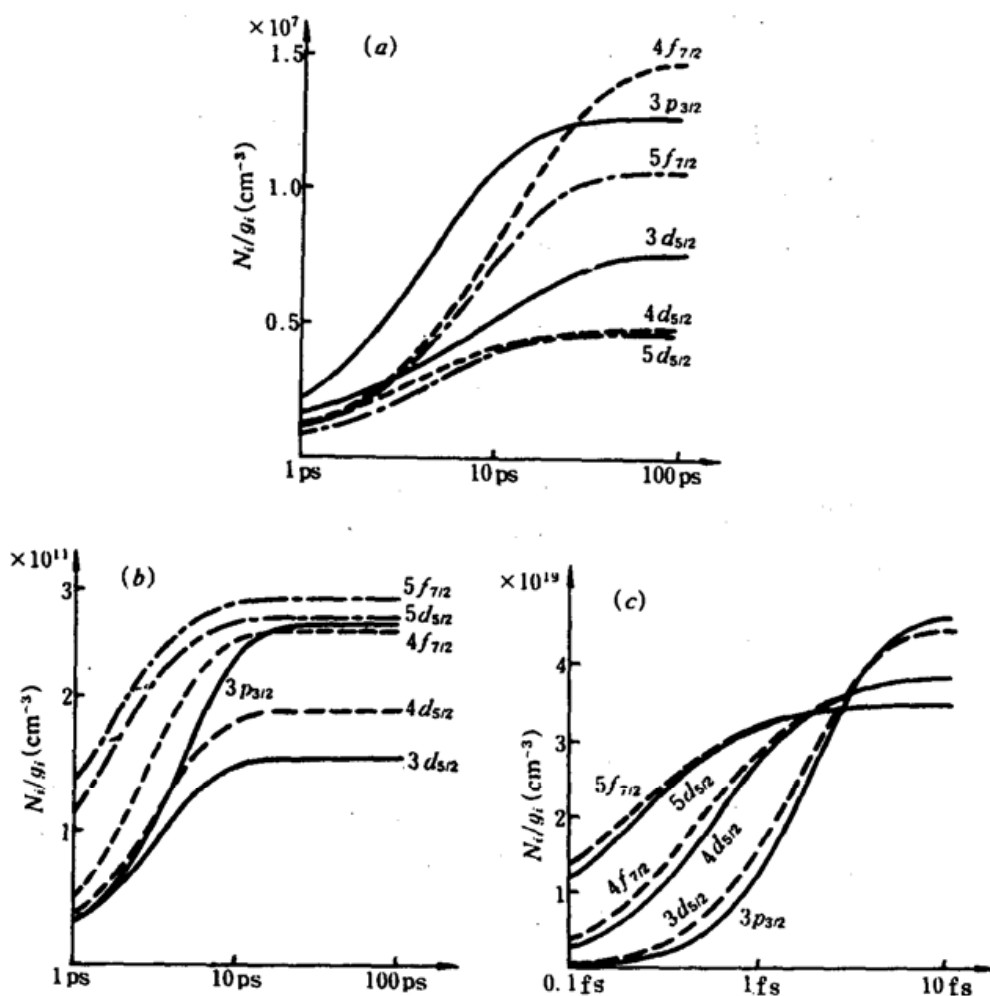


Fig. 2 "Pure atomic" relaxation of reduced population densities

$N_i/g_i$  ( $g_i$  = statistical weight),  $\delta = 1$ ,  $T_e = 300$  eV

(a)  $N_e = 10^{17}$  cm $^{-3}$ ; (b)  $N_e = 10^{19}$  cm $^{-3}$ ; (c)  $N_e = 10^{23}$  cm $^{-3}$

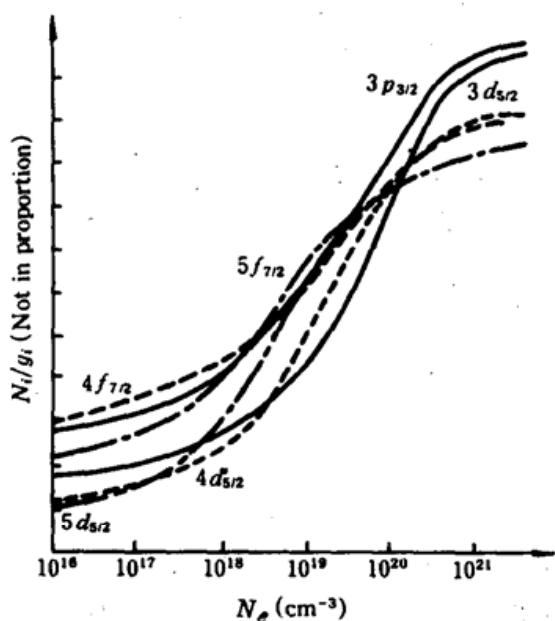


Fig. 3 Predicted evolution with electronic densities of reduced population densities,  $T_e = 300$  eV

随着电子密度增加,电子碰撞激发率将增大,所以弛豫时间逐渐缩短。还可以看出随着电子密度增大,粒子数的分布状况也在改变,这是因为在电子密度较低时,电子碰撞激发率、电子碰撞退激发率和自发辐射相比可忽略,所以得到的结果和日冕平衡相同(图 2 (a))而电子密度很高时,自发辐射又可忽略,所以得到的结果和局域热平衡结果相同(图 2(c)),这样可以看到,随着电子密度增加粒子数分布有从日冕平衡到碰撞—辐射平衡到局域热平衡的变化趋势,这个过程在图 3 中显得更加清楚,在图 3 中我们还可以看到  $T_e = 300$  eV 时,在  $N_e = 10^{19}$  cm $^{-3}$  左右  $5f-3d$ ,  $4f-3d$  的粒子数反转都达到最大,这表明在高温下,满足一定的丰度条件,并有合适的电子密度,也能产生粒子数反转。

## 参 考 文 献

- 1 D. L. Matthews *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(2), 110(1985)
- 2 P. Jaegle *et al.*, *J. Opt. Soc. Am. B*, **B4**(4), 563(1987)
- 3 Zhizhan Xu *et al.*, *Appl. Phys. B*, **B50**(3), 147(1990)
- 4 R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, U. California Press, Berkeley, Calif., 1981, 457
- 5 G. Jamelot, *IEEE Trans. on Plasma Sci.*, **16**(5), 497(1988)
- 6 李跃林 *et al.*, *光学学报*, **10**(6), 481(1990)
- 7 过增元 *et al.*, *电弧和热等离子体*, 科学出版社, 1986, 262~263
- 8 康寿万 *et al.*, *等离子体手册*, 科学出版社, 1981, 93~96
- 9 R. L. Kelly, *Atomic and Ionic Emission Lines Bellow 2000 Angstroms* 1973, 170
- 10 H. Guennou *et al.*, *J. Phys. B: At Mol. Phys.*, **20**, 919~934(1987)

## 力科光电有限公司向国内外用户致意

力科光电有限公司是经营光电产品为主的专业公司,公司以优质的技术服务,最佳的品质服务于国内外用户,一个电话或一封信,您的需要就得到满足。

力科公司向您提供:

1. 非线性晶体: KTP, ADP, KDP, DKDP, LI, LBO 等和这些晶体制作的二倍频器、三倍频器、四倍频器、Q 开关等;
2. 用于微电子和光电子器件的衬底和外延片 (MOCVD 和 MBE);
3. 激光晶体: Nd: YAG, Nd: YVO<sub>4</sub>, Nd: YAP, Cr: Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>, Ti: Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>;
4. 声光晶体: LN, PbMoO<sub>4</sub>, LT, TeO<sub>2</sub>, Li<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub>;
5. 光学材料: CaF<sub>2</sub>, BaF<sub>2</sub>, MgF<sub>2</sub>, NaCl, KBr, KCl;
6. 各种光学调整架,各种光学元件的夹具,激光电源,超微光摄像机, ZJD-003 型激光打孔机,激光图像通讯机, TXK 人体死后时间测定仪,便携式激光痕迹检查仪,便携式多波段激光痕迹检查仪,半导体激光报警器;
7. 提供您在济南的各种服务,如住宿,车票,接待。车票请提前四天电告 831365。力科公司将在全国各地招聘业务员,愿者请来信来电,待遇从优。
8. 力科公司愿与各界同仁通力合作,可为厂矿、企业推销产品,请寄说明书和合作意向。

力科光电有限公司

济南市七里河路 32 号

邮 编: 250100

联系人: 祁建平

传 真: 0531-837760

电 话: 0531-831365

上海联系电话: 4701390-207 陈以超

北京联系电话: 7711177-463 李 港

传真: 7714088