

类镍钽离子碰撞激发机制理论研究

郑无敌 蓝 可

(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

提要 对类 NiTa 离子电子碰撞激发机制产生 $4d \rightarrow 4p$ 跃迁三条激光线的增益与反转进行了探讨。首先研究了类 Ni 离子基态与类 Co 离子基态对这三条激光线上、下能级的激发与复合贡献因子及由激发产生的反转率和由复合产生的反转率;讨论了类 Ni 离子与类 Cu 离子电离速率对类 Ni 离子布居弛豫时间和布居大小的影响。研究表明,考虑光子捕获效应及激光折射效应后,4.483 nm 激光线的最佳增益区域在 $T_e \approx 1 \sim 1.5$ keV, $N_e \approx (1 \sim 4) \times 10^{21}$ cm⁻³。

关键词 类 NiTa 离子电子碰撞激发机制, 自电离与双电子俘获(A&C), 光子捕获效应

1 引 言

尽管类 Ni 离子 X 光激光在实验上已取得了相当成绩,获得饱和输出^[1],但对类 NiTa 离子 $4d \rightarrow 4p$ 线仅测到增益^[2],远没有做到饱和。类 NiTa 离子 $J = 0 \rightarrow 1$ 跃迁(4.483 nm)波长已被证明为属于生物活性细胞全息摄影最佳波长之一,它处于水窗边缘,既可以获得很高的分辨率,远超过通常光学技术,又无须太强的 X 光激光,可以避免生物组织的损伤。因而,对类 NiTa 离子的研究具有特别重要的意义。但目前理论上的工作还很少^[3]。本文将用矩阵分块法求解速率方程组,研究类 NiTa 离子 $4d \rightarrow 4p$ 跃迁产生的三条激光线(4.483 nm, 5.097 nm 和 7.442 nm)的反转与增益,为实验提供理论依据。

2 物理模型

研究类 NiTa 离子碰撞激发机制产生 X 光激光的模型中,考虑了电子碰撞激发和退激发、线跃迁、碰撞电离、三体复合、辐射复合、自电离与双电子俘获等过程。激发态包含单激发态及通过自电离可跃迁为基态的双激发态,因激发布居概率远小于 1,且电离与复合为慢过程,所以忽略激发态间的电离和复合;取主壳层 n 中各能级简并,将主量子数截断到 10,认为 $n > 10$ 的态处于热动平衡;其中将类 Ni 离子 $n = 4$ 壳层分到细致组态,各细致组态间及其与基态的碰撞激发、退激发速率和线跃迁速率,自电离速率由 Cowan 程序给出,其余参数取自 T. Y. Lee 半经验公式。

由于碰撞机制中,准静态近似是一个很好的近似,它不仅使得标志状态的参数大大减少,还可获得清晰的物理图像,故本文采用准静态近似,并用矩阵分块法^[4]求解速率方程组。为便于后面说明,下面给出准静态近似下速率方程组

$$\frac{dP_g^m}{dt} = \chi^{m, m-2} P_g^{m-2} + \chi^{m, m-1} P_g^{m-1} - \chi^{m, m} P_g^m + \chi^{m, m+1} P_g^{m+1} + \chi^{m, m+2} P_g^{m+2} \quad (1)$$

$$P_i^m = \sum_{m'=m-1}^{m+1} a_{i, g}^{m, m'} \cdot P_g^{m'} \quad (m = M_1, \dots, M_2; i = 1, 2, \dots, n_m) \quad (2)$$

这里 m 表示某离子的束缚电子数, 简称该离子为 m 离子。分别用 (m, g) 和 (m, i) 表示处于基态与处于第 i 激发态的 m 离子。 P_g^m, P_i^m 分别为 (m, g) 与 (m, i) 的布居概率。 $\chi^{m, m-2}, \chi^{m, m-1}$ 是 $(m-2, g), (m-1, g)$ 到 (m, g) 的复合速率, $\chi^{m, m+2}, \chi^{m, m+1}$ 是 $(m+2, g), (m+1, g)$ 到 (m, g) 的电离速率, $\chi^{m, m}$ 是由 (m, g) 跃迁到其他各态的所有速率总和, $\chi^{m, m'} > 0$ 。 $a_{i, g}^{m, m-1}, a_{i, g}^{m, m}, a_{i, g}^{m, m+1}$ 分别为 $(m-1, g), (m, g), (m+1, g)$ 到 (m, i) 的复合、激发及电离的贡献因子。在我们感兴趣的等离子体状态 $a_{i, g}^{m, m+1} \ll a_{i, g}^{m, m-1}, a_{i, g}^{m, m}$ 。设 m 离子的第 u, l 激发态分别为激光上下能级, 小信号增益 g 可以写成

$$g = \sigma N_i P_u^m \nu; \quad \nu = 1 - \frac{g_u}{g_l} \cdot \frac{P_l^m}{P_u^m} = 1 - \frac{g_u}{g_l} \cdot \frac{a_{l, g}^{m, m-1} P_g^{m-1} + a_{l, g}^{m, m} P_g^m}{a_{u, g}^{m, m-1} P_g^{m-1} + a_{u, g}^{m, m} P_g^m} \quad (3)$$

这里 σ 为增益截面, N_i 为离子密度, ν 为反转率, g_u, g_l 为激光上下能级的统计权重。本文研究的类 Ni-Ta 离子三条激光线的上下能级如表 1。

表 1 类 Ni-Ta 离子 $4d \rightarrow 4p$ 跃迁三条激光线的上下能级

Table 1 Upper and lower levels of the three laser lines of Ni-like Ta $4d \rightarrow 4p$ transition

λ nm	Upper level	u	Lower level	l
4.483	$3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4d_{3/2}^1 (J = 0)$	36	$3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4p_{3/2}^1 (J = 1)$	8
5.097	$3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4d_{3/2}^1 (J = 0)$	36	$3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4p_{3/2}^1 (J = 1)$	11
7.442	$3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4d_{3/2}^1 (J = 2)$	24	$3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4p_{3/2}^1 (J = 1)$	11

3 贡献因子与电离速率

由(2), (3)式可看出, 增益和反转率与类 Ni 离子基态的激发贡献因子 $a_{i, g}^{28, 28}$ 及类 Co 离子基态的复合贡献因子 $a_{i, g}^{28, 27}$ 密切相关。下面来研究这两个贡献因子。准静态近似下, $a_{i, g}^{m, m'}$ 只与 N_e, T_e 有关。由图 1(a), (b) 和表 2 可以看出, 随 T_e 的上升, $a_{i, g}^{28, 28}$ 单调上升, $a_{i, g}^{28, 27}$ 则下降。这是因为随着温度的升高, 各种复合过程都将减弱, 但碰撞激发随之增强。因此, T_e 不能太低, 否则激发贡献因子太小, 从而影响对激光上能级的布居。对 4.483 nm 与 5.097 nm 线, 激光上能级的布居主要来自类 Ni 离子基态的激发, 而下能级的布居则部分来自类 Co 离子的复合, 因此必须防止等离子体过电离。对于 7.442 nm 激光线, 低温时, 激光上下能级的布居都主要来自类 Co

表 2 $N_e = 4 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 时, 在不同温度下, 类 Ni 离子基态与类 Co 离子基态对三条激光线上下能级的激发和复合贡献因子

Table 2 Excitation and recombination contribution factors to upper and lower levels of the three laser lines by Ni-like ion or Co-like ion's ground levels at $N_e = 4 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$

i	$T_e = 1 \text{ keV}$		$T_e = 2 \text{ keV}$		$T_e = 3 \text{ keV}$	
	$a_{i, g}^{28, 28}$	$a_{i, g}^{28, 27}$	$a_{i, g}^{28, 28}$	$a_{i, g}^{28, 27}$	$a_{i, g}^{28, 28}$	$a_{i, g}^{28, 27}$
36	4.9E-3	1.7E-3	9.6E-3	8.4E-4	1.1E-2	5.4E-4
24	7.8E-3	1.8E-2	1.4E-2	8.1E-3	1.6E-2	5.0E-3
11	2.8E-3	4.2E-3	4.8E-3	1.8E-3	5.4E-3	1.1E-3
8	5.0E-3	8.8E-3	8.4E-3	3.5E-3	9.5E-3	2.1E-3

离子基态的复合; 在高温时, 则来自类 Ni 离子基态的激发。因此过电离对该线影响不大, 类似于类 Ne-Ge 离子 $J = 2 \rightarrow 1$ 跃迁的情形。

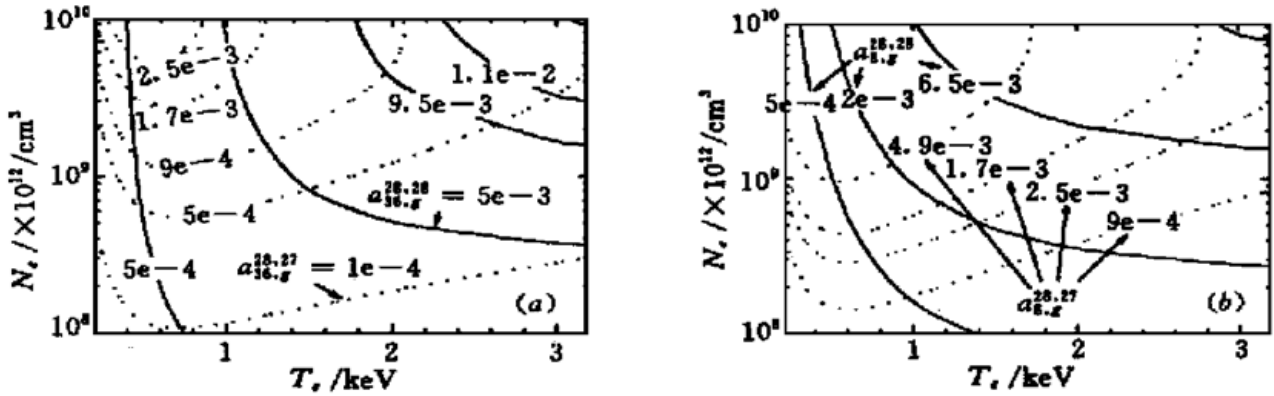


图 1 类 Ni 离子基态与类 Co 离子基态对 4.483 nm 激光线上能级 (a) 和下能级 (b) 贡献因子等值图
 Fig. 1 Contribution factors to the upper level (a) and to lower level (b) of 4.483 nm line by ground states of Ni-like ion and Co-like ion

$$\text{如定义 } \gamma_r = 1 - \frac{g_u}{g_l} \cdot \frac{a_{l,g}^{m,m-1}}{a_{u,g}^{m,m-1}} \text{ 和 } \gamma_e = 1 - \frac{g_u}{g_l} \cdot \frac{a_{l,g}^{m,m}}{a_{u,g}^{m,m}}, \text{ 则 } P_u^m \gamma = P_g^{m-1} a_{u,g}^{m,m-1} \gamma_r + P_g^m a_{u,g}^{m,m} \gamma_e .$$

这里 γ_e 表征由于类 Ni 离子基态电子碰撞激发产生的反转, 而 γ_r 则是由于类 Co 离子基态复合产生的反转。对 4.483 nm 与 5.097 nm 线, $\gamma_e \gg \gamma_r$, 且 $\gamma_r < 0$; 对 7.442 nm 线, $\gamma_r > \gamma_e$, 因而过电离对前者的影响严重大于后者; 另外, 前者产生增益的 N_e 区域比后者高。

$\lambda^{27,28}$, $\lambda^{28,29}$ 分别为类 Ni 与类 Cu 离子的电离速率, 对于处于电离过程中的等离子体, $\lambda^{27,28}$ 决定了类 Ni 离子布居的弛豫时间, 即激光线增益的维持时间, 而 $\lambda^{27,28}$, $\lambda^{28,29}$ 快慢的相对比, 则是决定类 Ni 离子布居大小(即增益大小)的重要因素。这是因为如果 $\lambda^{27,28} > \lambda^{28,29}$, 则来的不如走的快, 故类 Ni 离子丰度不可能很大, 反之, 若在很大的 T_e, N_e 范围内 $\lambda^{27,28} \ll \lambda^{28,29}$, 则类 Ni 离子丰度一定可以处于绝对优势。然而由图 4, 类 Cu 离子和类 Ni 离子的电离速率在很大区域都非常接近, 造成等离子体很容易过电离, 这与类 Ne-Ge 离子碰撞激发机制很不同, 后者在很大的 N_e/T_e 区域里类 Ne 离子布居处于绝对优势。因此类 Ni 离子布居较大的等离子体中总含有一定丰度的类 Co 离子。已有实验指出, 类 Ni 离子 X 光激光实验中同时观测到了类 Co 离子激光线^[5]。可进一步看到, 低温下类 Cu 离子基态的电离速率快于类 Ni 离子基态, 而高温下则反之。这是因为低温下, 电离速率决定于 e^{-I_n/T_e} , 这里 I_n 为电离能; 而在高温下, 基态最外壳层束缚电子数则起着重要作用, 类 Cu 基态 $n = 4$ 上有一个束缚电子, 但类 Ni 基态 $n = 3$ 上则有 18 个。因此, 为了得到类 Ni 离子较大的布居并维持较长的时间, 同时防止等离子体过电离, 要求 T_e 不宜过高。由图 2 可见, 要满足 $\lambda^{27,28} < \lambda^{28,29}$ 的条件, T_e 必须低于 1.5 keV。

4 自电离与双电子俘获在离子布居中的重要作用

长脉冲驱动的等离子体基本处于稳态, 下面在稳态近似下作讨论。对中、高 Z 元素, 自电离与双电子俘获(A&C)过程对等离子体的布居(从而对能级的反转与增益)起着重要的作用。由图 3 和图 4 可以看出, 不考虑 A&C 将严重降低等离子体的电离度, 所得到的增益目标区域明显向低 T_e 区域移动。需要说明的是, 这里忽略了单激发态与双激发态间的 A&C。其原因一是双激发态与基态间的 A&C 速率远高于双激发态与单激发态的, 二是基态布居概率远大于单

激发态的。实际上类 Ni 离子基态通过双电子俘获跃迁到类 Cu 离子双激发态, 然后由类 Cu 离子双激发态通过自电离跃迁到类 Ni 离子激光上、下能级的这一复合过程, 即文献[3]中的“共振激发”, 会影响类 Ni 离子基态对激光能级的相对布居, 从而影响反转与增益。但是文献[3]中仅考虑了类 Ni 离子基态到类 Ni 离子 $n = 4, 5$ 壳层细致能级的共振激发, 并没有考虑其他离子的 A&C, 从而不可能准确地得到类 Ni 离子布居大的 N_e/T_e 区域; 另外, 作者考虑的“共振激发”仅是 A&C 的一个近似, 采用的分支比中不包含电子碰撞过程, 同时也没有考虑“共振退激发”, 从而夸大了 A&C 对反转的影响。

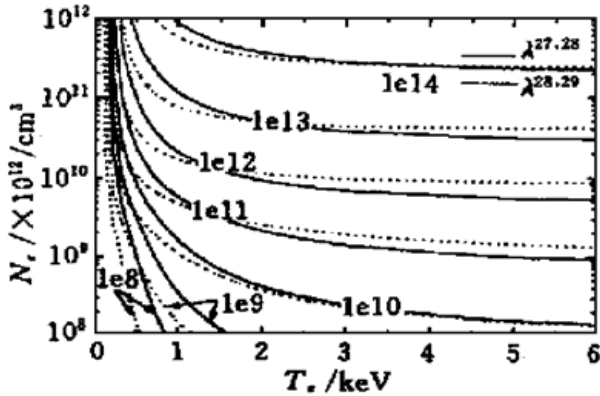


图 2 类 Cu 离子和类 Ni 离子的电离速率 $\lambda^{28,29}, \lambda^{27,28}$

Fig. 2 Contour line of ionization rates of Cu-like Ta ($\lambda^{28,29}$) and Ni-like Ta ($\lambda^{27,28}$)

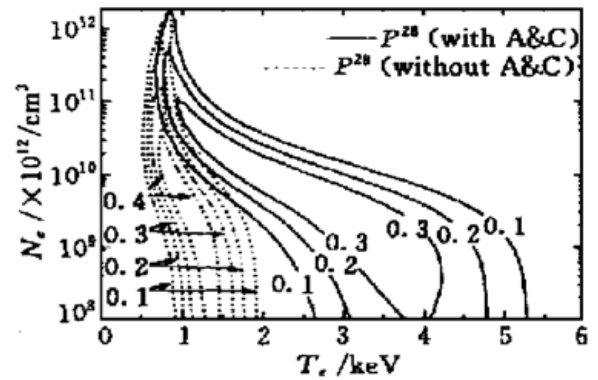


图 3 速率方程中考虑与不考虑 A&C 两种情况下, 类 Ni 离子基态的布居概率 P_g^{28}

Fig. 3 Contour lines of P_g^{28} , the fractional population of Ni-like ion, with and without autoionization and dielectronic capture

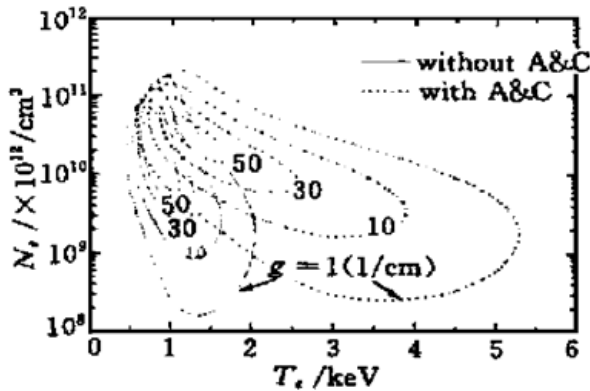


图 4 考虑与不考虑 A&C 时 4.483 nm 线的增益
Fig. 4 Comparison of gain at 4.483 nm line with and without A&C

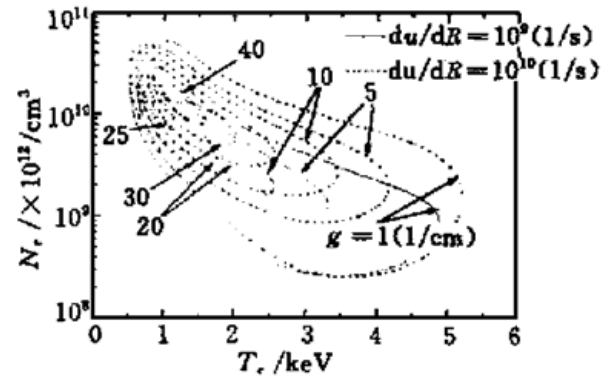


图 5 考虑光子捕获效应, 取速度梯度 $du/dR = 10^9 \text{ s}^{-1}, 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 时 4.483 nm 线的增益
Fig. 5 Effect of resonance line reabsorption on gain of 4.483 nm line at velocity gradients of 10^9 s^{-1} and 10^{10} s^{-1}

5 考虑光子捕获效应后的反转与增益

激光产生的等离子体中, 绝大多数谱线是光性薄的, 但共振线的光子捕获效应则很严重。我们采用逃逸概率方法研究类 Ni-Ta 离子碰撞激发机制中的光子捕获效应。逃逸概率用平板等离子体模型逃逸概率近似表达式计算^[6]。计算中, 我们考虑了 Ta 等离子体中所有主壳层共

振线和类 Ni 离子 $n = 4$ 壳层所有细致能级共振线的逃逸概率。

碰撞机制中, 与等离子体空间尺度相关的光学厚度远大于 1, 决定逃逸概率的只有与等离子体速度梯度有关的 Soblev 厚度。图 6 中给出速度梯度分别为 $du/dR = 10^9 \text{ s}^{-1}$, 10^{10} s^{-1} 两种情况下 4.483 nm 线的增益, 前者对应于脉宽~ 1 ns 的长脉冲抽运, 后者对应~ 100 ps 的短脉冲抽运。可以看到, 光子的捕获效应使增益峰值下降, N_e/T_e 平面上的增益区域变窄, 同时增益区域明显地向低电子密度区域漂移。

为得到大的增益长度积, 由上面结果, 并考虑到折射效应, 取增益 $g > 1 \text{ cm}^{-1}$ 。由图 5, 4.483 nm 激光线的最佳增益区域在 $N_e \approx (1 \sim 4) \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $T_e \approx 1 \sim 1.5 \text{ keV}$ 。实验中^[2]采用脉宽为 0.5 ns 的二倍频抽运光, 在 4.483 nm 激光线上获得 2~ 3 cm^{-1} 的增益, 测得产生增益的 $N_e \sim 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $T_e \sim 1 \text{ keV}$, 这在我们给出的增益目标区的低温低密度部分。根据我们的研究结果, 建议实验上采用较高功率的短脉冲二倍频或三倍频抽运光(100 ps), 以创造 N_e , T_e 均较高的等离子体状态, 得到饱和增益长度积。更短脉冲抽运下的等离子体的流体力学行为和反转动力学过程将会与长脉冲抽运情形有所不同。

6 结 论

研究表明, 第一, 类 Ni-Ta 离子碰撞激发产生的 $J = 0 \rightarrow 1$ 跃迁的 4.483 nm 与 5.097 nm 两条激光线上能级的布居主要来自类 Ni 离子基态的碰撞激发, 而下能级则部分来自类 Ni 离子基态的碰撞激发, 部分来自 Co 离子基态的复合, 故要得到高增益, 必须防止等离子体的过电离, 同时激发贡献因子随 T_e 的上升而增大, 故 T_e 不能太低; 而 $J = 2 \rightarrow 1$ 跃迁的 7.442 nm 线的上、下能级在低温时都主要来自类 Co 离子基态的复合, 高温都来自类 Ni 离子基态的激发, 故过电离对其反转与增益不会产生不利影响。第二, 类 Cu 离子和类 Ni 离子的电离速率在很大的区域上都非常接近, 造成等离子体易过电离, 且类 Ni 离子的丰度不可能很大, 为使类 Ni 离子电离速率慢于类 Cu 离子电离速率, T_e 必须低于 1.5 keV。第三, 自电离与双电子俘获过程对离子的布居有重要影响, 而“共振激发”近似则夸大了自电离与双电子俘获对反转的影响。第四, 光子捕获效应使得增益峰值明显下降, 增益区域变窄并同时向低电子密度区域漂移。第五, 由以上结果, 并考虑到碰撞机制中产生 X 光激光的等离子体区域一般位于临界面以内, 故水窗附近的 4.483 nm 线的最佳增益区域应在 $N_e = (1 \sim 4) \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 1 \sim 5 \text{ keV}$, 建议实验上用二倍频甚至三倍频, 脉宽~ 100 ps 的抽运光来抽运 Ta 靶, 以获得 4.483 nm 激光线的饱和输出。

致谢 作者衷心感谢邱玉波研究员与邹宇博士在原子参数计算中给予的帮助。

参 考 文 献

- 1 J. Zhang, A. G. Macphee, J. Nilsen *et al.*. Demonstration of saturation in a Ni-like Ag X-ray laser at 14 nm. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**(20): 3856~ 3859
- 2 B. J. MacGowan, S. Maxon, L. B. D. Silva *et al.*. Demonstration of X-ray amplifiers near the carbon K edge. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(4): 420~ 423
- 3 M. H. Chen, A. L. Osterheld. Effects of autoionizing resonances on electron-impact excitation rates and gain calculations for Ni-like tantalum. *Phys. Rev. A*, 1995, **52**(5): 3790~ 3795
- 4 Lan Ke, Zhang Yuquan. The solution and the study of the coupled rate equations in high temperature and high density plasmas. *High Power Laser and Particle Beams* (强激光与粒子束), 1995, **7**(2): 225~ 234 (in Chinese)
- 5 B. J. MacGowan, L. B. Da Silva, D. J. Keane *et al.*. Observation of $3d^8 4d-3d^8 4p$ soft-X-ray laser emission in

- high-Z ions isoelectronic to Co I. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, **65**(19): 2374~ 2377
- 6 Y. T. Lee, R. A. London, G. B. Zimmerman *et al.*. Application of escape probability to line transfer in laser produced plasmas. *Phys. Fluid B*, 1990, **2**(11): 2731~ 2740

The Theoretical Study of Ni-like Ta Collisional Excitation X-ray Laser

Zheng Wudi Lan Ke

(*Institute of Applied and Computational Mathematics, Beijing 100088*)

Abstract The gains for the three $4d \rightarrow 4p$ lasing transitions in Ni-like Ta collisional excitation X-ray lasers are studied in this paper. The study shows that gain and inversion at 4.483 nm and 5.097 nm lines are mainly contributed by collisional excitation from the ground state of Ni-like ion, while gain and inversion at 7.442 nm are mainly contributed by both collisional excitation from the ground state of Ni-like ion and recombination from the ground state of Co-like ion. In addition, the ionization rates from Cu-like ion and Ni-like ion in the important region are of the same order, which leads not only to overionization but also to low fractional population of Ni-like ion. The important role of autoionization and dielectronic capture in the ion population is also discussed. Moreover, the effect of resonance lines reabsorption is studied by escape factor method. Finally, as a result of study, the optimum region for gain in N_e/T_e plane at 4.483 nm laser line is: $T_e \approx 1 \sim 1.5$ keV, $N_e \approx (1 \sim 4) \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$.

Key words Ni-like Ta collisional X-ray laser, autoionization and dielectronic capture (A&C), reabsorption of resonance lines