

# 用于研究铝等离子体软 X 射线 光谱的碰撞-辐射模型

李跃林 徐至展 陈时胜

(中国科学院上海光学精密机械研究所)

## 提 要

我们建立了一个以 AlXI 和 AlXII 离子为主的碰撞-辐射模型, 模型中考虑了碰撞电离和复合, 碰撞激发和退激发, 辐射复合和自发辐射跃迁等原子过程。本文还分析了该模型的计算结果, 包括离子丰度分布, 辐射损失, 及诊断的特性。

关键词: X 射线光谱; 激光等离子体。

## 一、引 言

以铝元素为靶材的激光等离子体实验研究内容很丰富, 除等离子体光谱发射效率研究外<sup>[1~4]</sup>, 还有 X 射线在铝箔中的穿透<sup>[5]</sup>, 几何靶研究<sup>[6,7]</sup>, 以及利用类锂 AlXI 离子的复合泵浦进行自发辐射放大研究<sup>[8,9]</sup>。针对实验, 大量的计算机实验分析了铝等离子体的光谱发射<sup>[10~18]</sup>、离子丰度分布<sup>[6,10~13,15]</sup>及诊断特性<sup>[11,16,17]</sup>, 探讨了 AlXI 离子中粒子数反转现象<sup>[18]</sup>, 提供了有价值的理论参数。

长期以来, 我们在光谱学和流体动力学行为方面对铝激光等离子体进行了大量实验研究<sup>[19~22]</sup>, 最近又实现了 AlXI  $3d-5f$  ( $105 \text{ \AA}$ ) 跃迁的自发辐射放大<sup>[23]</sup>。为了配合实验研究的进展, 我们编制了用于计算铝等离子体软 X 光光谱发射的碰撞-辐射模型, 简称 ALSX。该模型未包括流体动力学行为, 主要用于研究 AlXI、AlXII 离子的态分布和光谱特点随时间的变化。本文将 ALSX 的初步结果与不同的模型进行了比较, 提出了其可能的应用。如果改变原子参数, ALSX 还可用于计算其它元素的等离子体。

## 二、模型描述

ALSX 的结构是: 输入离子密度  $n_i$  ( $n_i$  在计算中为常量) 及初始电子温度  $T_0$  后, 程序按萨哈分布和玻尔兹曼分布求出等离子体初态, 然后对一组速率方程进行数值积分, 给出态分布和辐射损失随时间的变化。该模型考虑的是等离子体加热完成之后的辐射冷却过程, 这与假定温度和密度都是常数的模型是不同的<sup>[11~16]</sup>, 对于在极短时间内被加热到高温度的等离子体, 例如亚皮秒激光打靶, 是很好的近似。

模型中未计入流体动力学因素, 一方面是为了计算简便, 同时也参照了一些实验研究。

这些研究指出, 近界面的等离子体的自由膨胀对远离界面的软 X 光谱发射影响甚微<sup>[2]</sup>。而且, 由于本模型未考虑光性影响, 其讨论只适用了光电离和光激发对态的重新分布的影响与碰撞过程相比是可以忽略的情形<sup>[13]</sup>。

1. 原子模型

我们选用的原子模型(图 1)是在 J. Davis 的基础上<sup>[1]</sup>, 去掉其双激发态, 增加了 AlXIII, AlX 的基态和 AlXII 的两个最低态。在图 2 给出的铝的透射光栅谱仪摄得的光谱中<sup>[25]</sup>, 这些能级间的跃迁是主要的线状谱。在选择能级的同时, 我们还考虑了计算机时间的限制。

我们还应注意, 图 1 中的全部能级对角量子数简并; 这一近似对于高碰撞等离子体和我们的实验精度说来, 是合理的。

2. 速率方程及速率系数

初始温度  $T_0$  给定后, 电离态丰度由改进萨哈分布给出:

$$N^{z+1}/N^z = (G_1^{z+1}/G_1^z) \exp(\xi - \chi_z/T_0), \quad (1)$$

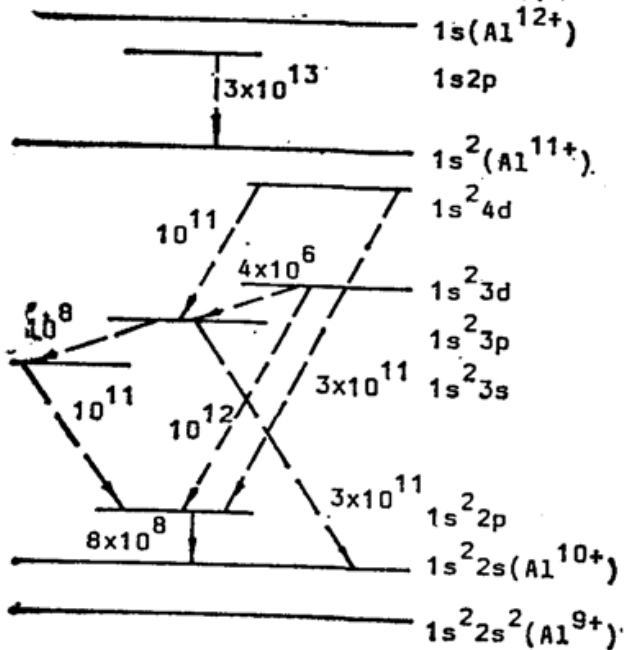


Fig. 1 Atomic levels used in the model. Arrows indicate the transitions. Transition rates are also given in  $s^{-1}$

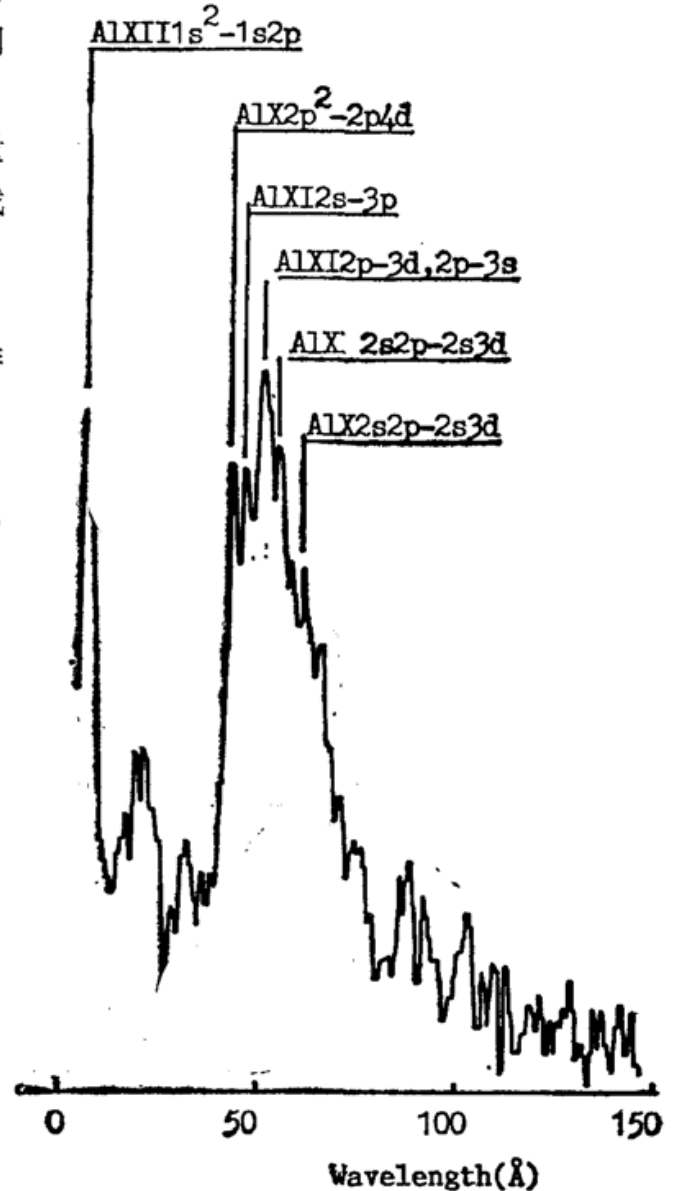


Fig. 2 Spectral density trace of a typical Al spectrum by a transmission grating spectrometer

其中  $N$ 、 $G$ 、 $\chi$  为态丰度, 基态统计权重和电离能,  $\xi$  为电离参数<sup>[1]</sup>。同一电离级的态通过碰撞达到玻尔兹曼分布:

$$N_i^z/N_j^z = (G_i^z/G_j^z) \exp(-\Delta E_{ij}/T_0), \quad (2)$$

且

$$\sum_i N_i^z = N^z. \quad (3)$$

求解(1)~(3)式即可以得到等离子体初始状态。这一处理,在低密度时由于辐射复合使基态过填充,会有一定误差。

初态决定后,各态丰度随时间变化的速率方程为:

$$dN_i^z/dt = \sum_{j,z} W_{ji}^z N_j^z - \sum_j W_{ij}^z N_i^z. \quad (4)$$

$W_{ij}$  和  $W_{ji}$  分别是  $z$  电离级的  $i$  态的排空和填充速率,包括了以下六种过程:碰撞电离和碰撞复合,辐射复合,碰撞退发和退激发,自发辐射跃迁。图 1 中已经给出了类氢和类锂离子激发态的平均自发跃迁系数<sup>[17,26]</sup>;其余 5 个过程,我们仍采用为大多数研究所采用的半经验公式<sup>[10,24,27]</sup>:

碰撞电离系数  $S_i^z$  为:

$$S_i^z = \frac{9 \times 10^{-6} \xi_i^z (T_e/\chi_i^z)}{(\chi_i^z)^{3/2} (4.88 + T_e/\chi_i^z)} \exp(-\chi_i^z/T_e) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (5)$$

由细致平衡可以推得其逆过程碰撞复合系数:

$$\beta^{z+1} = (h^2/2\pi m T_e)^{3/2} \exp(\chi_i^z/T_e) S_i^z. \quad (6)$$

辐射复合速率系数为:

$$\alpha^{z+1} = 5.2 \times 10^{-14} (\chi_i^z/T_e)^{1/2} z \left[ 0.429 + \frac{1}{2} \log(\chi_i^z/T_e) + 0.47 (T_e/\chi_i^z)^{1/2} \right] \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (7)$$

碰撞激发系数  $X_{ij}^e$  为:

$$X_{ij}^e = 1.6 \times 10^{-11} \langle \bar{g} \rangle f_{ij} \exp\left(-\frac{\Delta E_{ji}}{T_e}\right) / \Delta E_{ji} T_e^{1/2} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (8)$$

其逆过程碰撞退激发系数也由细致平衡推得:

$$X_{ji}^d = \frac{g_i}{g_j} \exp\left(\frac{\Delta E_{ji}}{T_e}\right) X_{ij}^e. \quad (9)$$

其中  $\chi_i^z$ ,  $\xi_i^z$  分别是  $z$  电离级  $i$  态的电离能和最外壳层电子数;  $\Delta E_{ji}$ ,  $f_{ij}$  为  $i$ 、 $j$  态之间能量差和振子强度;  $T_e$  为能量单位的电子温度;  $\langle \bar{g} \rangle$  为平均冈特因子,由于缺乏有效的公式<sup>[17,28]</sup>,我们只好取  $\langle \bar{g} \rangle = 1$ 。一般接受的值为 0.2<sup>[17]</sup>。

模型还考虑了韧致辐射损失<sup>[29]</sup>:

$$P_{f-f}^z = 1.5 \times 10^{-32} \sum_i T_e^{1/2} n_e z^2 N_i^z \text{ W/cm}^3. \quad (10)$$

于是系统能量损失为:

$$dE/dt = -\sum_z (P_{f-f}^z + P_{f-b}^z + P_{b-b}^z). \quad (11)$$

$P_{f-b}$ 、 $P_{b-b}$  分别是辐射复合及线辐射功率密度。电子动能与离子内能的平衡由碰撞平衡得到,从而给出  $dT_e/dt$ , 与上述(4)~(8)式偶合,即可以自恰地解出态丰度和辐射损失随时间的变化。

### 三、数值结果

ALSX 的特点就是自由辐射冷却,从而提供离子丰度和辐射损失的动态图象。

#### 1. 离子丰度分析

我们对两种离子密度  $n_i = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  和  $n_i = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  在初始温度为 1 keV 的条件下进

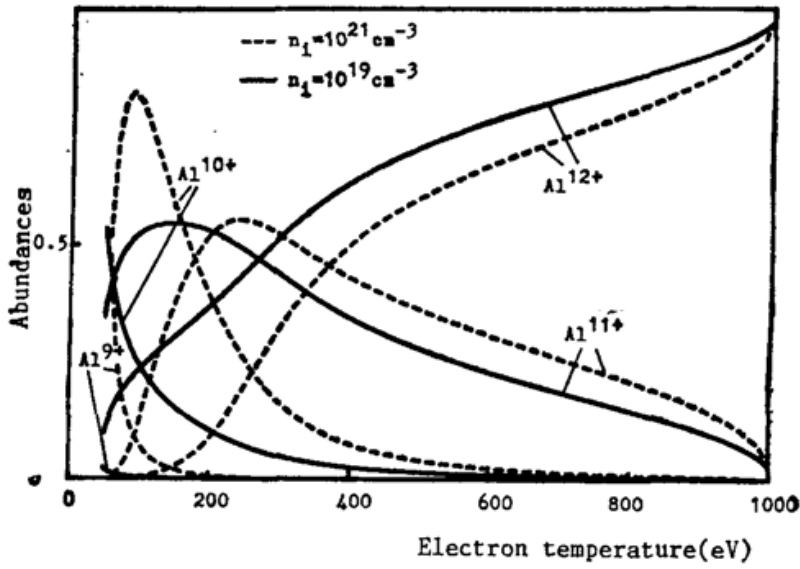


Fig. 3 Ion abundances vs. electron temperature

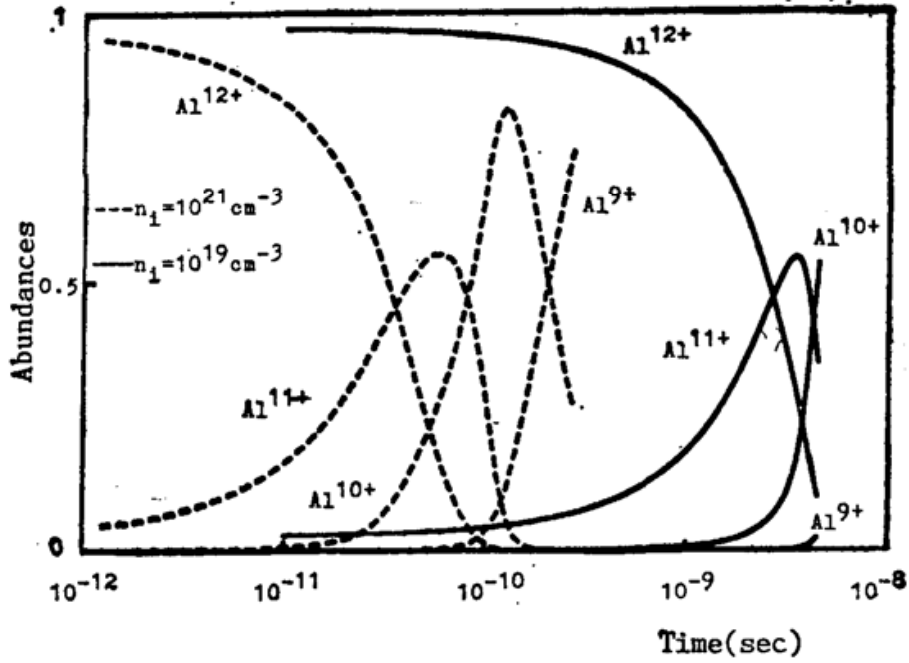


Fig. 4 Ion abundances vs. time

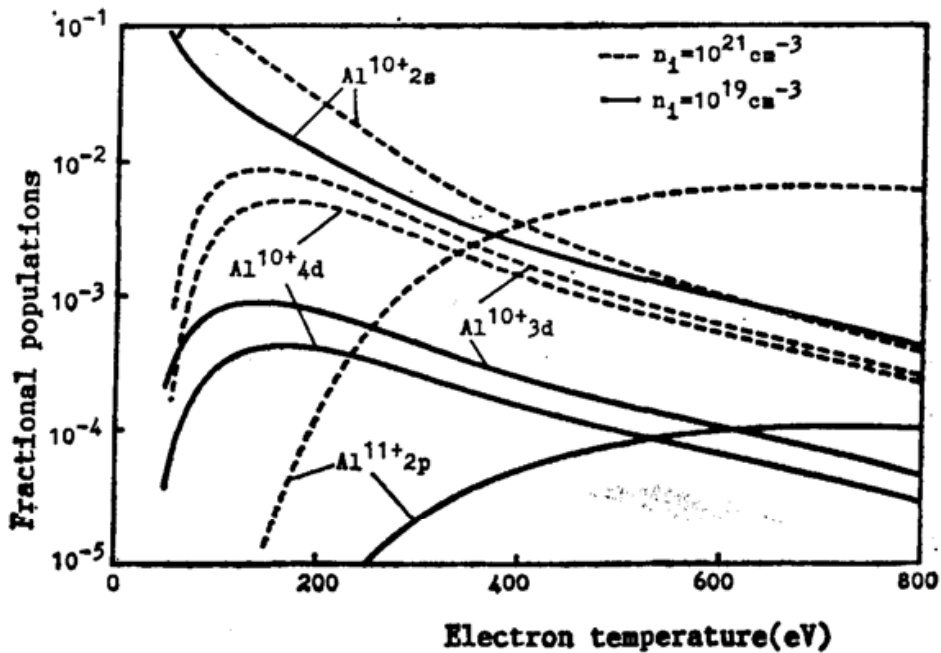


Fig. 5 Fractional level populations of AlXI and AlXII ions vs. electron temperature

行了试算,以下提到的高密度和低密度就分别对应这两种情况。

图 3 给出了 4 种离子丰度随电子温度的变化。最开始, AlXII、AlXIII 离子丰度有一快变化,可能是电离参数  $\xi$  偏大使初态计算不够准确。显然高密度下离子复合要快很多, AlXII、AlXI 离子在  $T_e=250$  eV 和 150 eV 左右达到峰值; 而低密度下的则在 150 eV 和 50 eV 以下。从图 4 的时间标尺来看则更为清楚, 高密度下 129 ps 时 AlXI 丰度达到峰值, 低密度下则迟致 4.5 ns 以后。这说明, 高密度等离子体比低密度的冷却得快得多。在下面的讨论中, 可以看出这是由于高密度等离子体具有大得多的辐射损失功率。

我们更关心 AlXI、AlXII 离子的激发态丰度。图 5 中给出了两种密度下 AlXI  $2s$ ,  $3d$ ,  $4d$  和 AlXII  $1s2p$  态丰度随温度的变化。在 AlXI 离子中, 基态  $2s$  丰度差别不大, 但低密度下激发态丰度要比高密度下低 1 个量级。AlXII 离子中更为明显, 其基态  $1s^2$  (参见图 3 中  $Al^{11+}$  丰度曲线, 由于  $1s2p$  丰度远小于 1,  $Al^{11+}$  主要成分是  $1s^2$  态) 丰度在两种密度下差别不是很大, 而激发态的丰度在低密度下要比高密度下低二个量级。其原因是碰撞复合速率 ( $\alpha n_e^2 n_i$ ) 减小 6 个量级。使由 AlXIII 基态通过碰撞使之填充的几率大为减小; 而其高激发能 (1549 eV) 又使其由 AlXII  $1s^2$  的碰撞激发很困难; 而 AlXI 离子的  $3d$ ,  $4d$  激发态虽然也受到碰撞复合速率降低的影响, 但由于其激发能量相对较小, 仍可以通过碰撞激发得到填充。这样, 就使 AlXII  $1s2p$  态丰度受密度降低的影响要大得多。辐射复合则对多离子基态丰度影响较为明显。图中  $3d$ ,  $4d$  峰值对应的温度也不尽相同, 表明激发态的近玻尔兹曼分布。

图 3 中较难理解的是 AlXII 离子只在 100 eV~300 eV 之间才能为主要部分。由于 AlXII 的电离能远比 AlXI 高, 其存在并作为主要成分的温度范围应该很宽, 一些文献中其丰度在数千 eV 和 100 eV 之间都接近于  $1^{[10\sim 12]}$ 。只有 D. Salzmann *et al.* 的结果与 ALSX 相近<sup>[13]</sup>。其原因尚待进一步研究。

## 2. 辐射损失

### (1) 线辐射损失

为了比较不同密度下的能量损失, 我们引入离子功率系数=辐射功率密度/离子密度。图 6 给出了线辐射功率系数随温度的变化。两种密度下  $K$  带 (AlXII  $1s^2-1s2p$ ) 和  $L$  带 (AlXI 的全部线辐射) 功率峰对应的电子温度基本相同, 但高密度的功率系数比低密度要高一个量级以上。但低密度下, 线辐射功率向  $L$  带漂移, 形成明显的峰。这现象与上面讨论的激发态丰度随离子密度的变化是相应的, 即 AlXII 离子  $1s2p$  态丰度对离子密度比 AlXI 中的激发态要敏感得多。

D. Duston *et al.* 在光性薄条件下<sup>[16]</sup>, 也得出了线辐射能量在低密度下向  $L$  带漂移, 且在  $n_e=10^{17}$  cm<sup>-3</sup> 时,  $L$  带功率系数超过了  $K$  带。但他们的线辐射总功率系数随密度降低反而上升; 如果图 4 的结果符合实际情况的话, 这是值得商榷的。

### (2) 辐射符合和韧致辐射

图 7 是辐射复合、韧致辐射各自的总功率系数, 和 AlXIII 离子的辐射复合功率系数随电子温度的变化。显然 AlXIII 离子的损失占辐射复合损失的主要成分, 且随温度变化的起伏很小。这一方面是 AlXII 离子电离能比其余的要高得多; 另一方面, 在温度较高时, 电子平均能量也高, 虽然 AlXIII 离子丰度很高, 也不能使复合提高; 而温度低时则反之。这

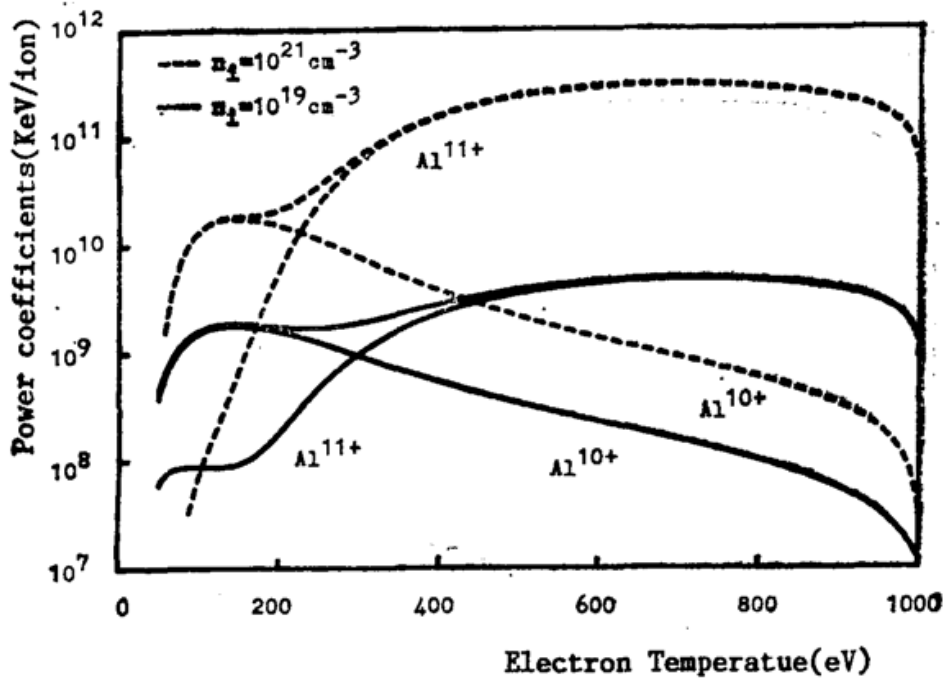


Fig. 6 Power coefficients of line emission vs. temperature; power coefficients of line emission from AlXII and AlXIII ions are also presented

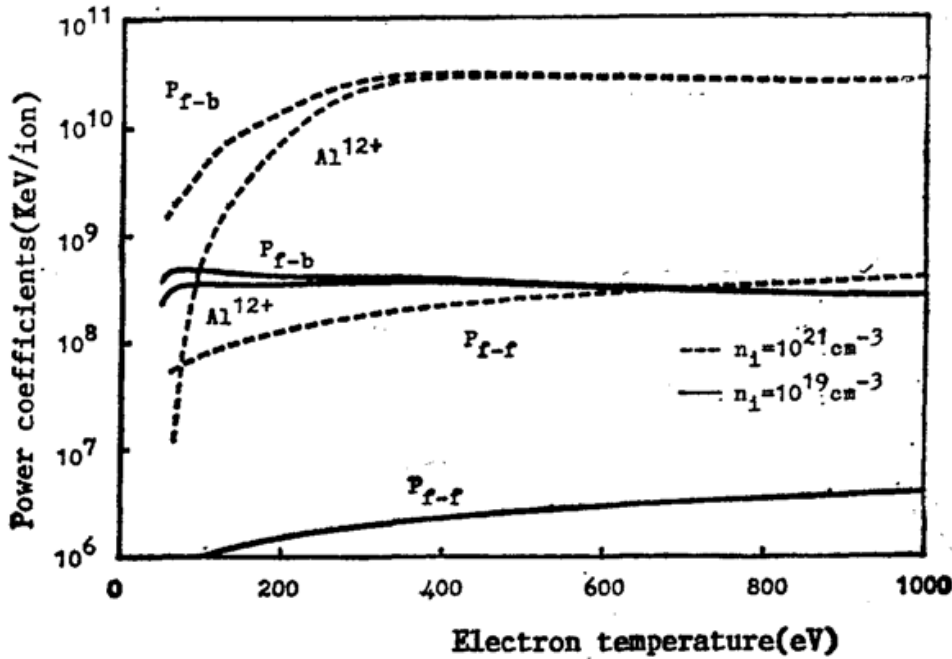


Fig. 7 Radiation recombination ( $P_{f-b}$ ) and bremsstrahlung ( $P_{f-f}$ ) power coefficients vs. electron temperature. Radiation recombination power coefficients of Al<sup>12+</sup> ion are also given

样虽然 AlXIII 离子随温度单调下降,其辐射复合的功率系数变化不大。

韧致辐射功率系数没有明显的电离阶依赖,随温度单调下降,数值比辐射复合低了 2 个量级。且两种连续谱的功率系数都随密度下降而下降。与图 6 的线辐射功率系数相比,线辐射损失是等离子体辐射损失的主要部分。

(3) 辐射总损失

图 8 是总辐射功率系数随时间的变化。显然,高密度下离子能量损失比低密度时要快得多。从表 1 中给出的积分辐射损失(积分范围是电子温度由 1 keV 降至 50 eV)来看,两

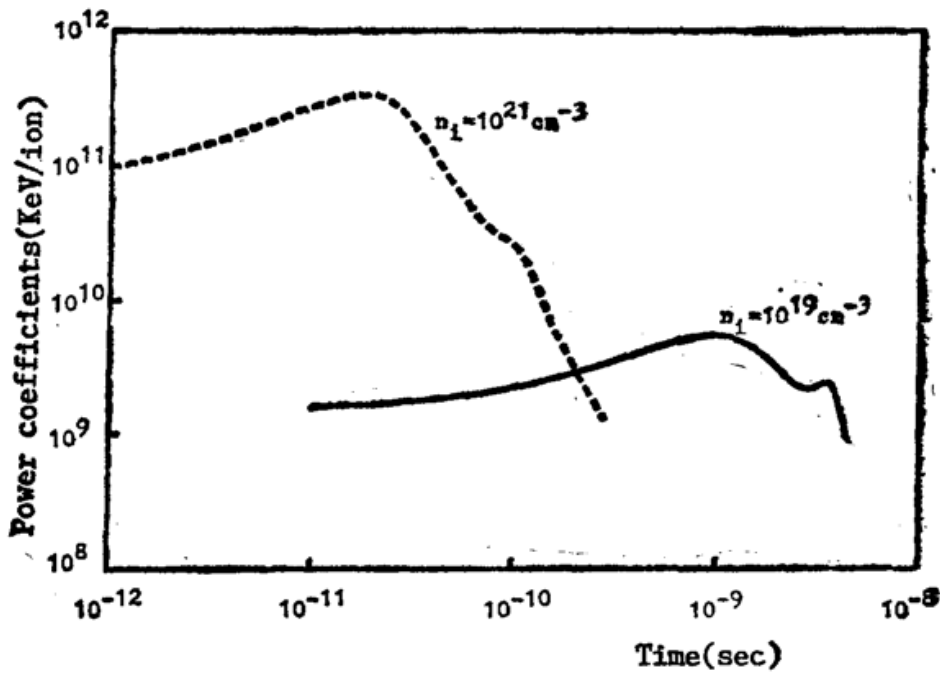


Fig. 8 Power coefficients of total radiation loss vs. time

Table 1 Radiation losses of aluminum plasmas

ion density	total loss (J/cm <sup>3</sup> )	b-b emission		f-b emission		f-f emission	
		energy(J/cm <sup>3</sup> )	Frac.	energy(J/cm <sup>3</sup> )	Frac.	energy(J/cm <sup>3</sup> )	Frac.
10 <sup>21</sup> /cm <sup>3</sup>	2.15 × 10 <sup>6</sup>	1.75 × 10 <sup>6</sup>	81.4%	3.97 × 10 <sup>5</sup>	18.4%	4.78 × 10 <sup>3</sup>	0.2%
10 <sup>19</sup> /cm <sup>3</sup>	2.16 × 10 <sup>4</sup>	1.88 × 10 <sup>4</sup>	87.1%	2.76 × 10 <sup>3</sup>	12.8%	15.8	0.07%

种密度下, 单离子损失的能量相差不多。这就为图 4 中高密度等离子体的迅速复合作出了说明。

表 1 还给出了三种辐射过程各自造成的能量损失及百分比。显然, 线辐射损失是辐射损失的主要成分; 韧致辐射的损失可以忽略, 且线辐射损失成分随密度降低而提高。这与 D. Salzmann 在准静态条件下得出的结果是相符合的<sup>[13]</sup>。

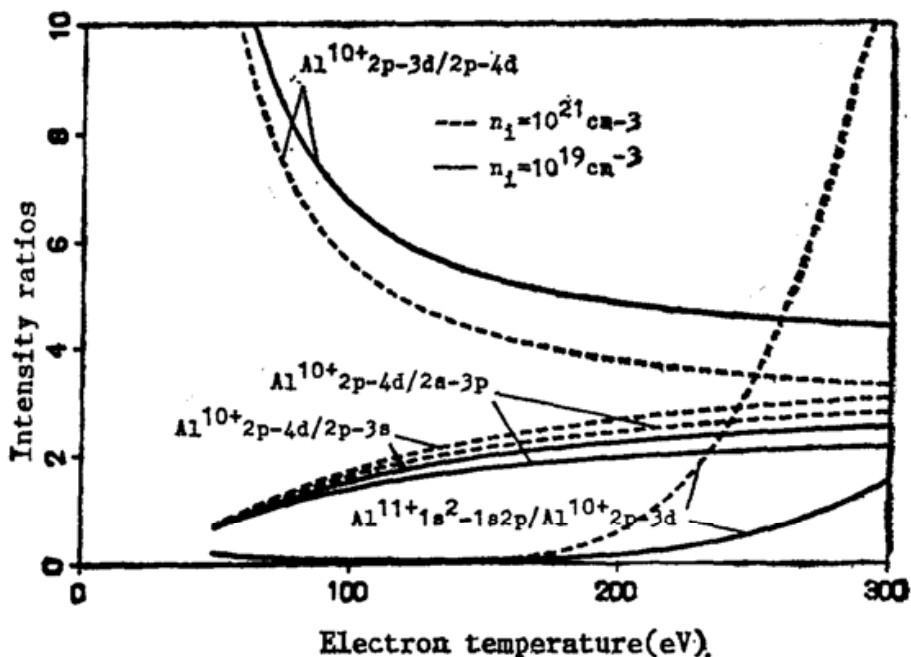


Fig. 9 Some line emission intensity ratios vs. electron temperatures

### (3) 线辐射强度比

本研究还希望能给出等离子诊断的判据,图9中,给出了两种密度条件下一组线谱强度比随电子温度的变化。 $AlXII\ 1s^2-1s2p/AlXI\ 2p-3d$  比值对密度的敏感性与前面两节的结果是相应的。另外三组比值是  $AlXI$  的  $2p-3d/2p-4d$ ,  $2p-4d/2s-3p$ ,  $2p-4d/2p-3s$ 。这些比值在密度改变了2个量级后变化不超过1,在所给出的温度范围内,温度对比值的灵敏性也很高。显然,它们对密度是非敏感的,其原因是这些跃迁基态能量相近,激发态能量也不很高,使之呈近玻尔兹曼分布,主要依赖于电子温度。从实验要求来看,这几个比值是较好的温度判据。

从这些比值来看  $2p-4d$  跃迁强于  $2s-3p$ ,  $2p-3s$ , 而从实验(图1)和文献看来<sup>[14,17]</sup>, 则反之。因此本节讨论只是一种半定量分析,其原因有待于进一步的研究。

## 四、结 论

我们对 ALSX 的最初步结果进行了分析,确定了以下基本结果:

(一) 高密度时碰撞复合是离子激发态填充的主要机制,这时该过程可以使高电离级粒子猝灭;随着温度下降,碰撞激发逐渐成为激发态填充主要机制;而辐射复合对离子基态丰度影响最大。

(二) 线辐射是等离子体辐射损失的主要成分,在  $n_e = 10^{21}\text{ cm}^{-3}$  时占总辐射的81%,随着密度降至  $n_e = 10^{19}\text{ cm}^{-3}$  上升到87%,且辐射能量向  $L$  带漂移;连续谱辐射的主要成分是辐射复合,韧致辐射损失小到可以忽略。

(三)  $AlXI$  离子的  $2p-4d/2s-3p$ ,  $2p-4d/2p-3s$  和  $2p-3d/2p-4d$  线谱强度比对离子密度变化不敏感,是可行的温度判据。

由于计算机时间限制,未选上的能级的影响未能计入;光性薄近似也使我们给出的辐射功率系数偏大;而我们更希望能在进一步的研究中计入对增益研究具有重要意义的  $AlX\ nf$  能级。

感谢陈荣清同志在程序编制过程中的大量帮助和有益建议,感谢张文琦同志、钱家钧同志的技术性帮助。

## 参 考 文 献

- [1] P. Alaterre *et al.*; *Phys. Rev. (A)*, 1986, **34**, No. 5 (Nov), 4184.
- [2] T. Mochizuki *et al.*; *Phys. Rev. (A)*, 1986, **33**, No. 1 (Jan), 525.
- [3] K. Eidmann, T. Kishimoto; *Appl. Phys. Lett.*, 1986, **49**, No. 7 (Aug), 377.
- [4] M. Chaker *et al.*; *Proc. SPIE.*, 1987, 831, 237.
- [5] Y. Kato *et al.*; *Proc. SPIE.*, 1987, 831, 46.
- [6] B. K. F. Young *et al.*; *Proc. SPIE.*, 1987, 831, 18.
- [7] A. G. M. Maaswinkel *et al.*; *Opt. Commun.*, 1984, **51**, No. 4 (Sep), 255.
- [8] P. Jaegle *et al.*; *Proc. SPIE.*, 1986, **688**, 18.
- [9] D. Kim *et al.*; *J. O. S. A. (B)*, 1989, **6**, No. 1 (Jan), 115.
- [10] K. G. Whitney, J. Davis; *J. Appl. Phys.*, 1974, **45**, No. 12 (Feb), 5294.
- [11] D. Duston, J. Davis; *Phys. Rev. (A)*, 1980, **21**, No. 5 (May), 1624.



- [12] R. K. Landshoff, P. Perez; *Phys. Rev. (A)*, 1976, **13**, No. 4 (Apr), 1619.
- [13] D. Salzmann, A. Krumbein; *J. Appl. Phys.*, 1978, **49**, No. 6 (Jun), 3229.
- [14] D. Duston, J. J. Duderstadt; *Phys. Rev. (A)*, 1978, **18**, No. 4 (Oct), 1707.
- [15] J. D. Perez, G. L. Payne; *Phys. Rev. (A)*, 1980, **21**, No. 3 (Mar), 968.
- [16] D. Duston, J. Davis; *Phys. Rev. (A)*, 1981, **23**, No. 5 (Mar), 2602.
- [17] J. Davis, K. G. Whitney; *J. Appl. Phys.*, 1976, **47**, No. 4 (Apr), 1426.
- [18] H. Guennou, A. Sureau; *J. Phys. B*, 1987, **20**, No. 2 (Feb), 919.
- [19] Feng Xianping *et al.*; *J. Fis. Mal.*, 1989, **10**, No. 2 (Jun), 49.
- [20] 冯贤平等;《光学学报》, 1989, **9**, No. 8 (Apr), 680.
- [21] Zhi-zhan Xu *et al.*; *Opt. Commun.*, 1988, **69**, No. 1 (Jan), 49.
- [22] 江志明等;《物理学报》, 1988, **37**, No. 10 (Oct), 658.
- [23] 徐至展等;《中国激光》, 1989, **16**, No. 7 (Jul), 385.
- [24] N. Nakano, H. Kuroda; *Phys. Rev. (A)*, 1983, **27**, No. 27 (Apr), 68.
- [25] A. Pachtman; «*Postdoctoral Research Report*», (Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, March, 1989);  
A. Pachtman, Zhi-zhan Xu, Shi-sheng Chen, Hui-zhu Xiang, Ai-di Qian in «*Proceeding of the Second Symposium on Plasma-wave and Plasma-Matter Interactions*», (Association for Plasma Studies of China Report No. APS-88-006, paper D-1, November, 1988.)
- [26] L. A. Vainshtein, U. I. Saferonova; *At. Data. Nucl. Data. Tables*, 1978, **4**, No. 1 (Jan), 49.
- [27] D. Colombat, G. F. Tonon; *J. Appl. Phys.*, 1973, **44**, No. 8 (Aug), 3524.
- [28] J. Davis; *J. Quantum. Spectro. Radiat. Transfer.*, 1974, **14**, No. 7 (Jul), 549.
- [29] H. Griem; «*Plasma Spectroscopy*», (McGraw-Hill, New York, 1964).

## A collision-radiation model using in investigation of soft X-ray emission in aluminum plasma

LI YAOLIN, XU ZHIZHAN AND CHEN SHISHENG

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

(Received 10 January 1990)

### Abstract

A numerical model that is characteristic of atomic collision-radiation processes is established mainly concerning the radiation of AlXI and AlXII ions. Processes such as the collisional ionization and recombination, collisional excitation and deexcitation, radiation recombination, and spontaneous radiation are included. The dynamic results of ion abundances, radiation losses, and some line emission intensity ratios are discussed.

**Key words:** X-ray spectroscopy; laser plasma.