

文章编号: 0253-2239(2004)11-1581-4

毛细管放电条件下类氖序列原子参量计算与分析*

李思宁 程元丽 赵永蓬 王 骥

(哈尔滨工业大学可调谐激光技术国家级重点实验室, 哈尔滨 150001)

摘要: 利用多组态求解相对论性的 Hartree-Fock-Roothan 方程(HFR)方法计算了类氖离子($Z=13\sim 27$) $2s^2 2p^6 - 2s^2 2p^5 3s$ 能级之间跃迁的原子参量,包括类氖氩激光系统的能级,振子强度,自发辐射衰变速率,能级寿命,电子碰撞激发截面及电子碰撞激发速率系数等。以类氖氩离子为例,分析了等离子体内 46.9 nm 激光跃迁的粒子数反转的形成及谱线放大过程,讨论了其它几条谱线产生增益的可能性,分析了激光线振子强度随核电荷数的变化规律。根据获得的原子参量,计算了利用毛细管放电产生类氖氩和类氖氪 X 射线激光的放电参量,其中类氖氩毛细管放电的初始压强的范围为 30~90 Pa,放电电流峰值为 10~50 kA。理论计算结果为类氖氩 X 光激光实验分析,深入研究等离子体反转动力学,激光增益的估算及理论方案设计等提供了基本数据。

关键词: X 射线激光; 原子参量; 类氖氩离子; 毛细管放电

中图分类号: TN248 文献标识码: A

Computation and Analysis of Atomic Parameters in Ne-Like Sequence with Discharging Capillary

Li Sining Cheng Yuanli Zhao Yongpeng Wang Qi

(National Key Laboratory of Tunable Laser Technology, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001)

(Received 14 July 2003; revised 23 April 2004)

Abstract: The atomic parameters of the transition $2s^2 2p^6 - 2s^2 2p^5 3s$ of Ne-like ions with nuclear charge Z from 13 to 27, including energy level, oscillator strength, spontaneous radiation decay time, level life, electron-collision excitation cross-section, electron-collision excitation rate and so on are obtained by using Hartree-Fock-Roothan (HFR equations). The spectral line enlargement and population inversion formation in Ne-like Ar at 46.9 nm laser transition and the probability of gain generation of other spectral line are discussed with the help of the atomic data. The dependence of oscillator strength on nuclear charge is illustrated. The discharge parameters for Ne-like Ar and Ne-like Kr X-ray laser with capillary discharge are also given based on the obtained atomic parameters. The range of the initial pressure of Ne-like Ar gas is 30~90 Pa and the peak value of the discharge current is 10~50 kA for lasing of Ne-like ions.

Key words: X-ray laser; atomic parameters; Ne-like ions; capillary discharge

1 引 言

类氖离子电子碰撞激发 $3p-3s$ 跃迁软 X 射线激光是世界上首先演示成功的软 X 射线激光。近年来,有关利用毛细管快放电激励类氖离子产生软 X

射线激光的研究十分活跃。1999 年美国 Colorado 大学 Rocca 小组取得了突破性的进展,成功地获得了毛细管放电抽运的电子碰撞激发 46.9 nm 激光输出^[1],输出能量为 1 mJ,平均能量为 0.88 mJ,重复频率 4 Hz。这是目前光亮度最高的 X 射线源之一,并且其转换效率比传统的激光等离子体产生 X 射线激光有了显著的提高,是最有希望实现台式 X 射线激光器的方案之一,也是目前 X 射线激光的研究领域中的热点之一。

* 国家自然科学基金重点课题(60038010)、国家 863 计划(2003AA847100)资助课题。

E-mail: siningli@sina.com

收稿日期:2003-07-14;收到修改稿日期:2004-04-23

在 X 射线激光的研究中,为了定量地解释发生在热等离子体中的基本过程,为了确切地确定热等离子体中的一些宏观参量,诸如温度、电子密度、离子密度、等离子体中的离子组态的状态分布等,为了探讨激光机理和进行 X 射线激光实验的理论设计和实验结果的数据分析,都需要有精确的原子参量。美国 Los Alamos 国家实验室 Robert Cowan 编制的 Cowan 物理程序(Cowan physics code)由于其涉及面广,计算精度高,因而在国际国内 X 激光及原子物理学等领域广为使用^[2]。我们选用 Cowan 程序,详细计算了毛细管快放电条件下,类氙离子有关能级数据,包括:类氙激光系统的能级、振子强度、自发辐射衰变速率、能级寿命、电子碰撞激发截面及电子碰撞激发速率系数等。分析了产生 46.9 nm 激光的粒子数反转的形成及谱线放大的条件,讨论了其它几条谱线产生增益的可能性。为类氙 X 光激光实验分析,深入研究等离子体反转动

力学,激光增益的估算及理论方案设计等提供了基本数据。文章最后,根据获得的原子参量,计算了利用毛细管放电产生类氙和类氙 X 射线激光的放电参量。

2 参量计算

电子温度在 50~100 eV 时,等离子体内有较大的类氙离子丰度(~90%)^[8]。假设在该温度范围内电子遵从麦克斯韦分布。利用 Cowan 程序,适当选择其各控制卡参量,我们系统计算了毛细管快放电激励类氙离子产生 46.9 nm 激光和类氙硫离子产生 60.8 nm 激光的有关能级跃迁数据,部分数据列于表 1 和表 2 中。计算结果得到的类氙离子产生的激光波长为 46.7906 nm,类氙硫离子激光 60.7596 nm,数据误差分别为 0.18% 和 0.07%,与实验结果近似相等。

Table 1 Data of atomic parameters in Ne-like Ar

	$\lg(gf)$	gA/s^{-1}	$\Delta E/cm^{-1}$	$\lambda/\text{\AA}$	$R/(cm^3/s)$
$2p^{61}S_0-2p^53p^1S_0$	-7.0948	2.743×10^5	2261.71	44.214	1.4852×10^{-10}
$2p^{61}S_0-2p^53p^3P_0$	-9.1405	2.311×10^3	2187.96	45.705	1.4776×10^{-12}
$2p^{61}S_0-2p^53s^1P_1$	-0.755	4.921×10^{11}	2047.992	48.828	2.3846×10^{-11}
$2p^{61}S_0-2p^53s^3P_1$	-1.019	2.632×10^{11}	2030.373	49.252	1.5420×10^{-11}
$3p^1S_0-2p^53s^1P_1$	-0.691	6.207×10^9	213.718	467.906	
$3p^1S_0-2p^53s^3P_1$	-1.088	2.917×10^9	231.337	432.269	
$3p^3P_0-2p^53s^1P_1$	-1.354	5.783×10^8	139.971	714.436	
$3p^3P_0-2p^53s^3P_1$	-0.855	2.312×10^9	157.590	634.559	

Table 2 Data of atomic parameters in Ne-like S

	$\lg(gf)$	gA/s^{-1}	$\Delta E/cm^{-1}$	$\lambda/\text{\AA}$	$R/(cm^3/s)$
$2p^{61}S_0-2p^53p^1S_0$	-6.8928	2.046×10^5	1548.19	64.591	3.8247×10^{-10}
$2p^{61}S_0-2p^53p^3P_0$	-9.1600	1.030×10^3	1493.98	66.935	2.2537×10^{-12}
$2p^{61}S_0-2p^53s^1P_1$	-0.679	2.674×10^{11}	1383.609	72.275	8.8587×10^{-11}
$2p^{61}S_0-2p^53s^3P_1$	-1.131	9.304×10^{10}	1372.937	72.837	3.2092×10^{-11}
$3p^1S_0-2p^53s^1P_1$	-0.600	4.543×10^9	164.583	607.596	
$3p^1S_0-2p^53s^3P_1$	-1.167	1.394×10^9	175.255	570.596	
$3p^3P_0-2p^53s^1P_1$	-1.412	3.148×10^8	110.375	906.004	
$3p^3P_0-2p^53s^3P_1$	-0.764	1.683×10^9	121.407	826.125	

3 原子过程分析及讨论

类氙 $3p-3s$ 激光能级示意图如图 1 所示。对于等离子体中的电子碰撞激发过程,我们在计算时采用了 Cowan 提议的平面波 Born 近似作经验修正的方法,即由平面波 Born 近似的碰撞强度 $\Omega(X)$,得到经验修正的碰撞强度为

$$\Omega(X) = \Omega(X + 3/1 + X), \quad (1)$$

其中 $X = \epsilon/\Delta E$, ϵ 为自由电子动能, ΔE 为激发能。在麦克斯韦分布下计算了类氙离子碰撞激发速率系数,如图 2 所示。

从图 2 中可以看出电子温度在 60~80 eV 时,基态类氙离子碰撞激发到激光上能级 $2p^53p^1S_0$ 的速率系数较大($J=0 \rightarrow 1$ 单极激发),易于激光上能级的粒子数积累;同时,处于激发态的 $2p^53s^1P_1$ 及 $3P_1$ 向基态的辐射衰变概率为 $10^{11} s^{-1}$,而电子密度

范围在 $10^{18} \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时,从基态到激光下能级 $2p^5 3s \ ^1P_1$ 及 $\ ^3P_1$ 的碰撞激发概率为 $10^8 \sim 10^9 \text{ s}^{-1}$, 远小于这两个能级的衰变概率,有利于这两个激光下能级的抽空,所以在激光上下能级间形成了粒子数反转。由于处于高激发态的 $2p^5 3p \ ^1S_0$ 能级向基态 $2p^6$ 及 $2p^5 3s \ J=0$ 能级的跃迁属于偶极光学禁戒,它只能向 $2p^5 3s \ J=1$ 的能级发生辐射跃迁,而且,根据计算结果,激光下能级 $2p^5 3s \ J=1$ 向基态的跃迁概率比激光上能级 $2p^5 3p \ ^1S_0$ 向该能级的辐射跃迁概率大近一百倍,能够保持在 $2p^5 3p \ J=0$ 和 $2p^5 3s \ J=1$ 能级间的粒子数反转,从而使 $2p^5 3p \ J=0$ 态在辐射衰变中有受激辐射放大产生。

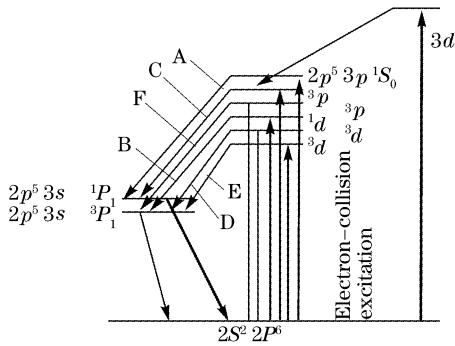


Fig. 1 $3p\text{-}3s$ energy levels of Ne-like Ar

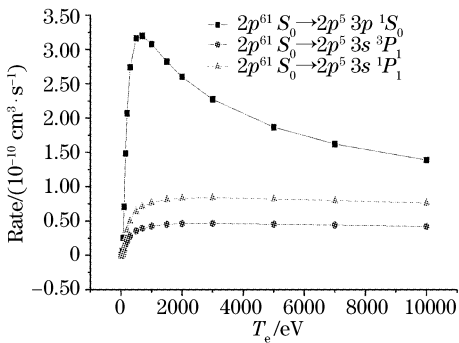


Fig. 2 The rates of electron-collision excitation in Ne-like Ar
此外,只有粒子数反转是不够的,还必须使这种均匀等离子体有一定厚度和一定维持时间。从图 3

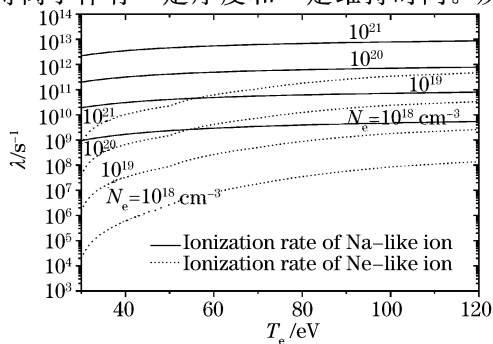


Fig. 3 Variation of the ionization rates of Ne-like ion and Na-like ion as T_e .

可看出 $\lambda^{10,11} \gg \lambda^{9,10}$ ($\lambda^{10,11}$ 是表征从类钠离子基态到类氩离子基态的电离速率, $\lambda^{9,10}$ 是表征从类氩离子基态到类氟离子基态的电离速率,均包括直接过程和间接过程),说明类 Na 离子容易电离到类 Ne 离子,同时类 Ne 离子比较难电离到类 F 离子,所以这导致在等离子体里产生了大量的能长时间存在的类 Ne 离子。

除了上面讨论的能级及跃迁过程外, $2p^5 3d$ 及其以上组态各能级的粒子数密度和它们向激光上下能级的跃迁也会对粒子数反转有影响。在精密的理论设计工作中需要严格求解包括各种过程在内的非平衡态动力学方程来研究这些过程的影响。

我们采用 HF 方法,选取 $2p^6, 2p^5 3s, 2p^5 3p$ 和 $2p^5 3d$ 组态,考虑相对论修正项,还对类氩系列离子进行了计算。图 4 给出了 $2p^5 3s \ ^3P_1$ 及 $\ ^1P_1$ 能级向基态跃迁的概率,随核电荷数 Z 的增加跃迁概率呈迅速增加趋势。图 5 给出了 $Z=20 \rightarrow 40$ 范围内两条激光线的振子强度的变化,可以看出,随 Z 的增加, $2p^5 3p \ ^1S_0 \rightarrow 2p^5 3s \ ^1P_1$ 激光线的振子强度缓慢减小, $2p^5 3p \ ^1S_0 \rightarrow 2p^5 3s \ ^3P_1$ 激光线的振子强度减小迅速。由于当激光线上下能级的粒子数密度一定时,增益系数随振子强度的减小而减小,说明高 Z 元素相对难获得较高增益。

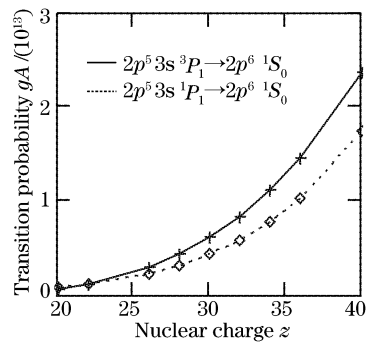


Fig. 4 Transition probability of $2p^5 3s \ ^1P_1$ and $\ ^3P_1$ to $2p^6 1S_0$

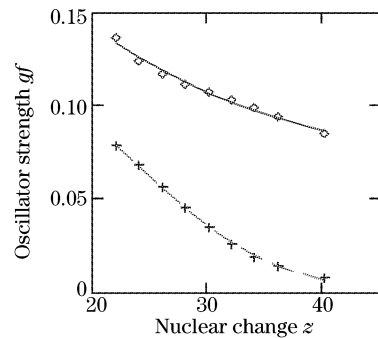


Fig. 5 Oscillator strength of laser transitions in Ne-like ions

4 毛细管放电类氩氙软 X 射线激光的放电参量

在电子碰撞机制中,单位时间内的碰撞次数依赖于电子的温度和密度。电子碰撞包括碰撞激发和退激发两方面。随电子密度的不断增加,激光上能级的退激发速率趋近于辐射衰变速率,则粒子数的反转将开始遭到破坏。这样在等离子体内为支持粒子数反转对,电子密度有一个上限的限制,由下式^[10]给出:

$$n_e^{\max} = \frac{5.1 \times 10^{24} A_{10}(kT_e)}{\lambda_{ul}^3 A_{ul} \langle G_{ul} \rangle} \text{ cm}^{-3}, \quad (2)$$

其中 G_{ul} 是修正因子,取值在 0.1~1 之间。 kT_e 为 60~80 eV,由 Cowan 程序计算结果, $A_{10} \sim 1.7 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$, $A_{ul} \sim 1.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$,所以最大电子密度 $n_e^{\max} \approx 1.9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,取最佳电子密度 $(n_e^{\max})_{\text{opt}} = n_e^{\max}/2 \approx 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 。在毛细管放电实验中,可以近似认为等离子体柱在坍塌时达到平衡,假设此时等离子体中绝大部分氩离子为 +8 价的类氩离子,即有 $n_e = 8n_p = 8n$, $T_e = T_p = T$,箍缩后的等离子体柱的最小半径 r_p 为 200~250 μm 左右,箍缩前毛细管半径为 2 mm,可得出箍缩前氩原子的粒子数密度为 $n_0 \approx (1.25 \sim 2.25) \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 。由气体状态方程 $P = nkT$,毛细管内初始氩气的压强应为

50~93 Pa。

贝奈特关系

$$I^2 = \frac{8P\pi^2 r^2}{\mu_0} = \frac{8\pi^2 r^2}{\mu_0} (n_e + n_i) kT_e, \quad (3)$$

给出了在平衡状态下联系等离子体平均温度、粒子数、总电流和柱半径的关系,可以用来估算对于给定单位长度粒子数和温度,约束等离子体柱所需的放电电流等数值。如取 $r_p = 200 \mu\text{m}$,电子温度 60 eV,那么由贝奈特公式算得所需的能够约束等离子体的电流为 $I \sim 39 \text{ kA}$ 。可见,为了约束高温等离子体,需要很大电流。如果电流上升得快,能够使等离子体与管壁快速分离,减少管壁烧蚀量,产生类氩氙软 X 射线激光要求 $dI/dt \sim 10^{12} \text{ As}^{-1}$,所以放电电流的半周期应小于 78 ns。文献[8]中,峰值电流为 39 kA,放电电流的半周期为 60 ns,我们的计算结果与其相符合。表 3 中给出了激励类氩氙和类氩氙 X 射线激光的等离子体参量和相应的放电条件。可以看出在一定的电流峰值和初始气体压强范围内都可获得 X 射线,这一结果和国外的实验结果相符合^[11]。但要得到激光增益和放大,电流脉冲、等离子体内电子和离子的温度、密度、类氩离子丰度等要很好地匹配,才能形成粒子数反转,这需要在实验中不断摸索。

Table 3 Discharge Parameters for Ne-like Ar and Ne-like Kr in capillary of 2 mm in radius

	Wavelength /nm	Radius of plasma / μm	Electron density / cm^{-3}	Electron temperature /eV	Initialization pressure /Pa	Peak value of current /kA
Ne-like Ar	40~70	150~250	$(0.5 \sim 2) \times 10^{19}$	60~90	30~93	10~54
Ne-like Kr	17~30	50~100	$(2 \sim 5) \times 10^{20}$	500~700	260~1000	80~140

参 考 文 献

- Macchietto C D, Benware B R, Rocca J J. Generation of millijoule-level soft-X-ray laser pulses at 4-Hz repetition rate in a highly saturated tabletop capillary discharge amplifier. *Opt. Lett.*, 1999, **24**(16): 1115~1117
- Cowan R D. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. California: University of California Press, 1981. 8-1, 16-1, 18-13
- Fedman U, Seely J F. Scaling of collisionally pumped 3s-3p lasers in the neon isoelectronic sequence. *J. Appl. Phys.*, 1984, **56**(9): 2475~2478
- Preissing N, Campos D O, Kunze H J. Relative intensities of 3p-3s transitions in neonlike Ar IX. *Phys. Rev. (E)*, 1993, **48**(5): 3867~3870
- Teng Guohua, Xu Zhizhan, Chen Baifei *et al.*. Calculation of meticulous energy level and soft X-ray spectrum in Li-like Ca. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 1993, **13**(2): 134~138 (in Chinese)
- Wu Mincun, Xu Zhizhan, Zhang Wenqi. Calculation of energy level and soft X-ray spectrum in Li-like Si. *Acta Optica Sinica* (光学学报), 1990, **10**(11): 961~969 (in Chinese)
- Li Yueming, Yu Zou. Calculation and discussion of atomic parameters in X-ray laser research. *High Power Laser and Particle Beams* (强激光与粒子束), 1991, **11**(7): 584~591 (in Chinese)
- Rocca J J, Shlyaptsev V, Tomasel F G *et al.*. Demonstration of a discharge pumped table-top soft-X-ray laser. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, **72**(16): 2192~2195
- Rocca J J, Cortazar O D, Szapiro B *et al.*. Fast-discharge excitation of hot capillary plasmas for soft-X-ray amplifiers. *Phys. Rev. (E)*, 1993, **47**(2): 1299~1304
- Niimi G, Hayashi Y, Nakajima M *et al.*. Observation of multi-pulse soft X-ray lasing in a fast capillary discharge. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2001, **34**: 2123~2126