

电子碰撞激发机制中自电离与双电子俘获^{*}

蓝 可 吴建周 张毓泉

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京8009信箱12分箱, 100088)

摘 要 以 Ge 为例, 研究了双电子复合代替自电离与双电子俘获对离子布居的影响; 通过解包括双激发态和自电离与双电子俘获过程的速率方程组, 研究了类 F 离子与类 Ne 离子基态对 19.6nm 与 23.6nm 激光线上、下能级的布居贡献因子及类 Na 离子与类 Ne 离子的电离速率, 并讨论了这两条激光线的反转与增益。

关键词 自电离与双电子俘获 双电子复合 类 Ne-Ge 离子碰撞机制
中图分类号 TN 241

在 X 光激光的理论研究中, 由于仅包括基态与单电子激发态的速率方程组本身就庞大而强刚性, 难以求解, 因此, 人们一般采用双电子复合代替自电离与双电子俘获过程来研究离子布居与能级布居^[1,2], 以避免进一步考虑数目众多的双激发态。但是双电子复合过程未考虑双激发态致稳过程中的电子碰撞过程, 同时也没有考虑离子通过双激发态的电离过程, 而某些情况下, 这些过程很重要, 这时用双电子复合代替自电离与双电子俘获过程, 便会使离子与能级的布居与实际情况偏离很大。矩阵分块法^[3]大大简化了速率方程组的数值求解, 使求解过程变得快速简捷。本文以 Ge 为例, 用矩阵分块法求解速率方程组, 研究用双电子复合代替自电离与双电子俘获对离子布居产生的影响, 结果表明采用双电子复合过程会使等离子体的电离度低于实际情况, 在某些类 Ne-Ge 离子碰撞激发产生 X 光激光的重要区域上, 尤为明显。因此, 为准确描述等离子体的布居, 应该求解包括双激发态和自电离与双电子俘获过程的速率方程组。在此基础上, 本文进而研究类 F 离子与类 Ne 离子基态对类 Ne-Ge 离子碰撞激发产生的 19.6nm 与 23.6nm 激光线上、下能级布居的复合与激发贡献因子, 以及类 Na 离子与类 Ne 离子的电离速率, 讨论了这两条激光线的反转与增益。

1 物理模型与速率方程的解

在研究类 Ne-Ge 离子碰撞机制产生 X 光激光的模型中^[3], 我们考虑了电子碰撞激发及退激发、线跃迁、电子碰撞电离、三体复合、辐射复合、自电离与双电子俘获等过程; 对激发态, 只考虑单电子激发态以及那些可由自电离成为基态的多电子激发态, 且忽略激发态间的电离及复合过程。取主壳层 n 中各能级简并, 并将主量子数截断到某一 n_c , 认为 $n > n_c$ 的态处于热动平衡; 其中将类 Ne 离子 $n=3$ 壳层分到细致组态, 各细致组态间及其与基态的碰撞激发速率是采用相对论扭曲波近似计算的。自电离速率是用 Cowan 程序^[4]计算的, 双电子俘获速率由细致平衡关系得到。其余参数均采用 T. Y. Lee 的半经验公式^[2]计算。

准静态近似是一个很好的近似, 而且准静态下, 标志状态的参数大大减少, 可以获得清晰的物理图象^[3]。本文将在准静态下研究类 Ne-Ge 离子 19.6nm 与 23.6nm 线的反转与增益。

* 国家自然科学基金资助课题, 课题号 19405003
1998年5月22日收到原稿, 1998年9月15日收到修改稿。
蓝可, 女, 1968年3月出生, 博士, 副研究员

为便于后面的说明,这里给出用矩阵分块法得到的准静态近似下速率方程组的解:

$$\frac{dP_g}{dt} = \lambda_g P_g \quad (1)$$

$$P_g^m = \sum_{m'=m-1}^{m+1} A_{g'}^{m',m} P_g^{m'} \quad (2)$$

其中

$$\lambda_g = \begin{pmatrix} -\lambda^{M_1, M_1} & \lambda^{M_1, M_1+1} & \dots & \lambda^{M_1, M_2} \\ \lambda^{M_1+1, M_1} & -\lambda^{M_1+1, M_1+1} & \dots & \lambda^{M_1+1, M_2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda^{M_2, M_1} & \lambda^{M_2, M_1+1} & \dots & -\lambda^{M_2, M_2} \end{pmatrix}, A_{g'}^{m',m} = (a_{1,g'}^{m',m}, a_{2,g'}^{m',m}, \dots, a_{n_m,g'}^{m',m})$$

这里 $P_g = [P_g^{M_1}, P_g^{M_1+1}, \dots, P_g^{M_2}]$, P_g^m 为 m 离子基态布居概率; $P^m = [P_1^m, P_2^m, \dots, P_n^m]$, P_i^m 为 m 离子第 i 激发态布居概率, n 为 m 离子最高激发态。(1) 式为基态的速率方程组, (2) 式为激发态表达式。用 (m, g) 表示 m 离子基态, (m, i) 表示 m 离子第 i 激发态。 $\lambda^{m, m-1}$ 表征 $(m-1, g)$ 到 (m, g) 的复合速率, $\lambda^{m, m+1}$ 表征 $(m+1, g)$ 到 (m, g) 的电离速率, 均包括直接过程与间接过程; $\lambda^{m, m}$ 为 (m, g) 的衰减速率。 $A_{g'}^{m-1, m}$ 、 $A_{g'}^{m, m}$ 及 $A_{g'}^{m+1, m}$ 的矩阵元 $a_{i,g'}^{m, m-1}$ 、 $a_{i,g'}^{m, m}$ 及 $a_{i,g'}^{m, m+1}$ 分别为 $(m-1, g)$ 、 (m, g) 及 $(m+1, g)$ 对 (m, i) 的复合、激发及电离的贡献因子。

2 用双电子复合过程代替自电离与双电子俘获对离子布居的影响

处于电离阈之上的双激发态, 电离一个电子, 同时无辐射地跃迁到下一个更高电离度离子态的过程, 称为自电离过程, 自电离的逆过程为双电子俘获。在离子布居动力学中, 自电离与双电子俘获是一对很重要的过程, 人们通常用双电子复合这样一个复合过程来代替自电离与双电子俘获。

双电子复合是一个两步过程: 首先, 一个自由电子被一个离子俘获, 同时该离子的一个束缚电子被激发, 形成双激发态; 然后, 处于该双激发态的离子通过电子碰撞退激发或线跃迁致稳。通常 $(m-1, g)$ 到单激发态 (m, i) 的双电子复合速率 $F_{i,g}^{m, m-1} = \sum_k b_{i,k}^m D_{k,g}^{m, m-1}$, 这里 $D_{k,g}^{m, m-1}$ 是 $(m-1, g)$ 到双激发态 (m, k) 的双电子俘获速率, $b_{i,k}^m$ 是分支比, 描述 (m, k) 线跃迁致稳的概率, 对 k 的求和包括了 m 离子的所有双激发态。通常, 忽略跃迁致稳中的电子碰撞过程, 取 $b_{i,k}^m = A_{i,k}^m / (\sum_j A_{j,k}^m + D_{g,k}^{m-1, m})$, 这里 $D_{g,k}^{m-1, m}$ 是 (m, k) 到 $(m-1, g)$ 的自电离速率, $A_{j,k}^m$ 是 (m, k) 到 (m, j) 的自发辐射速率, 对 j 的求和包括所有 (m, k) 可以发生自发辐射跃迁的态。我们的计算结果表明, 双电子复合这种近似处理将高剥离度离子的复合速率算大了, 而将低剥离度离子的复合速率算小了。另外, 还忽略了 (m, i) 通过内壳层激发及双激发态的自电离到 $(m-1, g)$ 的间接电离过程, 故所有离子的电离速率都被算小了。结果, 采用双电子复合过程代替自电离与双电子俘获降低了离子系统的电离度。

在速率方程组中采用自电离与双电子俘获及采用双电子复合的两种情况下, 图1给出了稳态下类 Ne-Ge 离子在 N_e/T_e 平面上等布居概率曲线。可以看到, 在类 Ne-Ge 离子碰撞激发产生 X 光激光部分重要 N_e/T_e 区域上, 用双电子复合代替自电离与双电子俘获会显著降低等离子体的电离度并影响对反转增益计算结果。因此, 为准确描述等离子体系统中离子与能级的布居, 更好地研究反转动力学, 应该求解包括双激发态和自电离与双电子俘获过程的速率方程组。在此基础上, 下面研究类 Ne-Ge 离子 19.6nm 与 23.6nm 激光线的增益。

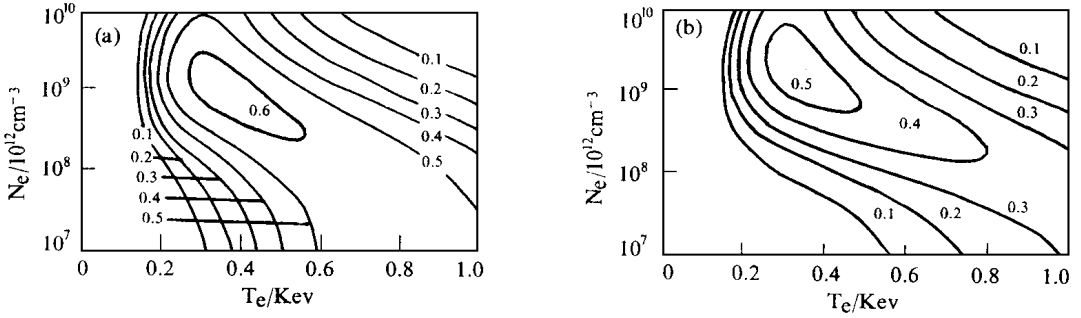


Fig 1 Comparison of A&C with DR in the fractional population of Ne-like ion in Ge plasma in steady state

(a) considering A&C

(b) Considering DR

图1 稳态下, 类Ne-Ge 离子在 N_e/T_e 平面上的等布居概率曲线

(a) 考虑双激发态和自电离与双电子俘获过程

(b) 采用双电子复合近似

3 19.6nm 与23.6nm 激光线的反转与增益

一般地, 由于内壳层激发与电离速率非常小, 故 $A^{m,m+1} \ll A^{m,m-1}, A^{m,m},$ 通常可以忽略。下面我们研究类F 离子及类Ne 离子基态对 19.6nm 及 23.6nm 激光线的复合和激发贡献因子, 然后讨论这两条激光线的反转及增益。

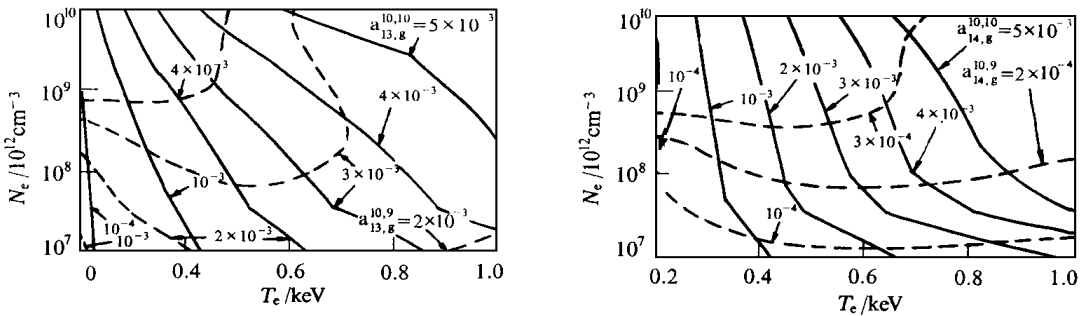


Fig 2 Contour lines of Contribution factors in the N_e/T_e plane $a_{i,g}^{10,9}$ and $a_{i,g}^{10,10}$ are contribution factors of recombination from the ground state of F-like ion; $a_{i,g}^{10,9}$ and $a_{i,g}^{10,10}$ are contribution factors of excitation from the ground state of Ne-like ion to $J = 0$ and $J = 2$, respectively.

图2 在 N_e/T_e 平面上, 类F-Ge 离子与类Ne-Ge 离子对 $J = 0, J = 2$ 能级的复合与激发贡献因子

按能级高低排序, $1s^2 2s^2 2p^5 3s J = 1, 1s^2 2s^2 2p^5 3p J = 2$ 及 $1s^2 2s^2 2p^5 3p J = 0$ 分别是类Ne 离子 ($m = 10$) 的第4, 第13, 及第14激发态。图2中, 我们给出了 N_e/T_e 平面上 $a_{i,g}^{10,m'}$ ($m' = 9, 10; i = 13, 14$) 的等值曲线(由于篇幅限制, 这里略去 $i = 4$ 的结果), 可以看出:

(1) 复合及激发贡献因子 $a_{i,g}^{m,m-1}$ 及 $a_{i,g}^{m,m}$ 均随 N_e 的上升而变大。

(2) 随 T_e 的上升, $a_{i,g}^{m,m}$ 将变小, 这与一般人们所认识的碰撞激发速率不同, 但 $a_{i,g}^{m,m-1}$ 则是非单调的。在 $(m - 1, g)$ 向离子的复合过程中, $(m - 1, g)$ 首先复合到 m 离子各激发态, 然后通过各激发态间快过程的调整, 最后布居到各激发态上^[3]。由于各种复合过程均随 T_e 的上升而变慢, 而电子碰撞激发及退激发过程则是在低温时随 T_e 上升迅速变快, 高温时却与 T_e 关系不大, 故 $a_{i,g}^{m,m-1}$ 随着 T_e 的上升, 在低温时变大, 而高温时变小。

(3) 在类Ne-Ge 离子碰撞激发产生 X 光激光的重要 N_e/T_e 区域上, $a_{4,g}^{10,9}$ 与 $a_{4,g}^{10,10}, a_{13,g}^{10,9}$ 与 $a_{13,g}^{10,10}$ 同量级, 但是 $a_{14,g}^{10,9} \ll a_{14,g}^{10,10}$ 。这意味着 $J = 1$ 及 $J = 2$ 能级布居由类F 离子基态的复合与

类Ne离子基态的激发共同贡献,但 $J = 0$ 能级的布居却主要靠类Ne离子基态的激发。这是导致19.6nm线与23.6nm线增益行为不同的重要因素。

(4) 假设 (m, u) 及 (m, l) 分别是激光上、下能级, g_u^m, g_l^m 为统计权重,定义反转率 $\mathcal{Y} = 1 - g_u^m P_1^m / g_l^m P_u^m$, $P_u^m \mathcal{Y}$ 为小信号增益的布居-反转因子。由 $P_i^m = P_g^{m-1} a_{i,g}^{m,m-1} + P_g^{m,m} a_{i,g}^{m,m}$ 得, $P_u^m \mathcal{Y} = P_g^{m-1} a_{u,g}^{m,m-1} \mathcal{Y}_r + P_g^{m,m} a_{u,g}^{m,m} \mathcal{Y}_e$, 这里, $\mathcal{Y}_r = 1 - g_u^m a_{l,g}^{m,m-1} / g_l^m a_{u,g}^{m,m-1}$, $\mathcal{Y}_e = 1 - g_u^m a_{l,g}^{m,m} / g_l^m a_{u,g}^{m,m}$ 。 $\mathcal{Y}_r, \mathcal{Y}_e$ 分别描述由复合和电子碰撞激发产生的反转率。准静态近似中, $P_u^m \mathcal{Y}$ 依赖于 N_e, T_e, P_g^{m-1} 及 P_g^m ; 稳态下,则仅依赖于 N_e, T_e 。下面我们分别用 $\mathcal{Y}_r^{196}, \mathcal{Y}_e^{196}$ 表示19.6nm激光线的 $\mathcal{Y}_r, \mathcal{Y}_e$,用 $\mathcal{Y}_r^{236}, \mathcal{Y}_e^{236}$ 表示23.6nm线的 $\mathcal{Y}_r, \mathcal{Y}_e$ 。由图3, $\mathcal{Y}_r^{196} \ll \mathcal{Y}_e^{196}, \mathcal{Y}_r^{236} > \mathcal{Y}_e^{236}$ 。这表明19.6nm线的反转主要是由激发产生,而23.6nm的反转由复合与激发共同产生。由图3还可以看到, $\mathcal{Y}_e^{196} > \mathcal{Y}_e^{236}$,这是由于19.6nm激光线上能级的统计权重小于23.6nm上能级的统计权重。

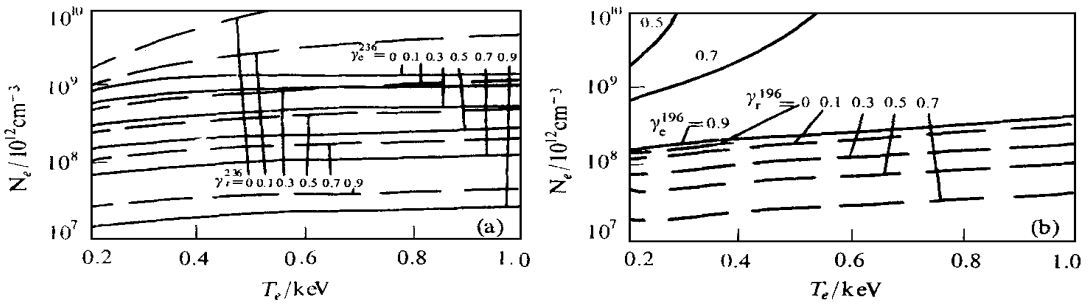


Fig. 3 Contour lines of inversion factor. \mathcal{Y}_e^{236} and \mathcal{Y}_r^{196} are inversion factors of 23.6nm and 19.6nm produced by recombination. \mathcal{Y}_e^{236} and \mathcal{Y}_e^{196} are that produced by excitation.

图3 $\mathcal{Y}_e^{236}, \mathcal{Y}_e^{196}$ 与 $\mathcal{Y}_r^{196}, \mathcal{Y}_r^{236}$ 在 N_e/T_e 平面上的等值曲线

由第1节知, $\lambda^{m,m+1}$ 为 $(m+1, g)$ 到 (m, g) 的电离速率。由图4,类Na离子的电离速率远大于类Ne离子的。因此,在电离的早期阶段,类Ne离子来不及电离到类F离子,类Ne离子布居占优的状态将维持 $(\lambda^{9,10})^{-1}$ 。而且,这一阶段的等离子体处于高温、高密度状态,故 $\alpha_{4,g}^{10,10}$ 及 \mathcal{Y}_e^{196} 均很大,故在19.6nm线上可以产生高增益。至于23.6nm线,当 N_e 很高时, $\mathcal{Y}_e^{236} \approx 0$,故 $J = 2$ 与 $J = 1$ 间难以反转。我们可以用短脉冲驱动Ge靶来获得19.6nm线的高增益。在短脉冲驱动产生的Ge等离子体中,泵浦光峰值过后,类Ne离子的布居占优,19.6nm线可能产生高增益并维持 $(\lambda^{9,10})^{-1}$ 。

实验结果显示^[5],19.6nm线增益峰值的产生总是先于23.6nm线。前面我们已指出,19.6nm线上能级布居依赖于 N_e, T_e, P^{10} ,而23.6nm线上能级布居还应包括 P^9 的贡献。但在电离早期阶段 P^9 很小, P^{10} 占优,两条激光线的增益都由 N_e, T_e, P^{10} 和相应的反转率决定。这一阶段等离子体处于高温高密度状态, $\mathcal{Y}_e^{196} > \mathcal{Y}_e^{236}$,因此19.6nm线增益大于23.6nm线增益。随着电离度增大和电子温度、密度的下降, P^9 对23.6nm线增益贡献逐渐增大,而 P^9 对19.6nm线下能级布居使19.6nm线反转率变小,且 P^9 的减少使19.6nm线上能级布居概率减少,从而导致19.6nm线增益的下降,这样23.6nm线增益峰值晚于19.6nm线增益峰值。

如果在电离的后期阶段或复合的早期阶段,等离子体过电离,类F离子布居概率很大,这对 P_{13}^{10} 及 \mathcal{Y}^{236} 影响不大,但对 P_{14}^{10} 及 \mathcal{Y}^{196} 却十分不利,故 g^{236} 可能会大于 g^{196} 。实验上采用预脉冲^[5]是克服过电离,提高 g^{196} 的有效手段。

4 结 论

结果表明, 采用双电子复合会降低等离子体的电离度, 在类 Ne- Ge 离子碰撞激发产生 X 光激光的某些重要 N_e/T_e 区域上, 尤为明显. 因此, 为准确描述等离子体系统中离子与能级布居, 应该在速率方程组中直接考虑自电离与双电子俘获过程. 研究类 F 离子、类 Ne 离子基态对 19.6nm, 23.6nm 激光线上、下能级的布居贡献因子的结果表明, $J = 1$ 和 $J = 2$ 的布居及 23.6nm 线反转的产生同时来自于类 F 离子基态的复合与类 Ne 离子基态的激发, 而 $J = 0$ 的布居及 19.6nm 反转的产生则主要来自于类 Ne 离子基态的激发. 另外, 类 Na 离子的电离速率远远大于类 Ne 离子, 因此可以在短脉冲驱动产生的 Ge 等离子体中获得 19.6nm 线的高增益, 增益将产生于泵浦光峰值之后, 维持时间约 $(\lambda^{9,10})^{-1}$. 又由于电离阶段早期, 等离子体处在高温高密度状态, 类 Ne 离子布居概率远大于类 F 离子, 19.6nm 线可以产生很大反转, 但 23.6nm 线却难以反转, 随着电离度增大和电子温度、密度的下降, 19.6nm 线反转率及上能级布居减小, 使其增益下降, 而类 F 离子对 23.6nm 线增益贡献越来越大, 结果导致了 19.6nm 线增益峰值的产生总是早于 23.6nm 线, 这与实验结果一致. 另一方面, 在电离阶段的晚期及复合阶段的早期, 等离子体过电离, 使类 F 离子的布居处于优势, 这时 19.6nm 线的增益会低于 23.6nm 线, 采用预脉冲是克服等离子体过电离的有效手段.

致谢 曾与于敏教授进行过多次有益的讨论; 曾得到李明月硕士、徐志谨博士的帮助, 在此一并表示衷心的感谢.

参考文献

- 1 Maxon S, et al *Phys Rev*, 1988, **A37**: 2227
- 2 Lee Y T. *JQSRT*, 1987, **38**: 131
- 3 蓝可, 张毓泉 高温高密度等离子体速率方程组的求解及离子布居的研究 *强激光与粒子束*, 1995, **7**(2): 225
- 4 Cowan R D. *The Theory of Atomic Structure and Spectra* Berkeley: University of California Press, 1986
- 5 Nilsen J, Moreno J C. *Phys Rev Lett*, 1995, **74**: 3376

AUTO IONIZATION AND DIELECTRONIC CAPTURE IN Ne-LIKE Ge COLLISIONAL X-RAY LASER

Lan Ke, Wu Jianzhou and Zhang Yuquan

Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, P. O. Box 8009-12, Beijing, 100088

ABSTRACT Comparison of autoionization and dielectronic capture with dielectronic recombination in ion population in Ge plasma was given. Solving the coupled rate equations, the contribution factors from F-like and Ne-like ions on the lower and the upper laser level of 19.6 and 23.6 nm lines, and the ionization rates of Na-like and Ne-like ions were studied. Furthermore, inversion factor and gain at 19.6 and 23.6 nm lines were discussed.

KEY WORDS autoionization and dielectronic capture, dielectronic recombination, Ne-like Ge plasma collisional x-ray laser

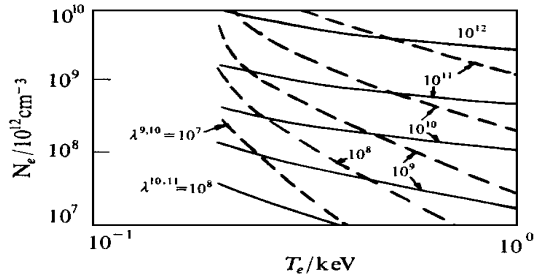


Fig 4 Contour lines of ionization rate $\lambda^{10,11}$ of Na-like ion and $\lambda^{9,10}$ of Ne-like ion

图4 在 N_e/T_e 平面上, 类 Na-Ge 离子电离速率 $\lambda^{10,11}$ 与类 Ne- Ge 离子电离速率 $\lambda^{9,10}$ 的等值曲线