

文章编号: 1001-3806(2002)02-0129-03

基于 OFI 类镍氙原子参数计算*

夏元钦 卢兴发 陈德应 吴小燕 王 骥

(哈尔滨工业大学光电子技术研究所, 哈尔滨, 150001)

摘要: 利用 Cowan 程序对类镍氙系统的原子参数进行了计算, 通过自行编制的辅助程序将原来仅以麦克斯韦分布为基础的 Cowan 程序推广到适用于任意电子能量分布的情形。计算的原子参数主要包括类镍氙系统的能级、振子强度、自发辐射衰变速率、能级寿命等。最后给出了 Kr IX 的简化能级图。

关键词: OFI 类镍氙系统; Cowan 程序推广; 类镍氙原子参数计算

中图分类号: TN24 文献标识码: A

Computation of atom parameters of Ni-like Kr based on OFI

Xia Yuanqin, Lu Xingfa, Chen Deying, Wu Xiaoyan, Wang Qi

(Institute of Opto-Electronics, Harbin Institute of Technology, Harbin, 150001)

Abstract: Based on Cowan program, atom parameters have been computed. Cowan program, based on Maxwell has been extended to be applicable for any electron distribution with the help of an additional program written by the authors. The computed parameters comprise the levels, oscillator strength, spontaneous decay rate coefficient and level lifetime.

Key words: OFI Ni-like Kr system; Cowan program; computation of atom parameters

引 言

最近, 由于在高强度、超短脉冲激光器方面获得的巨大进展导致了由超短脉冲驱动获得高重复频率软 X 射线激光引起人们极大兴趣, 现在比较流行的软 X 射线激光机制是由加拿大的 Corkum, Burnett 分别于 1988 年^[1]和 1989 年^[2]提出来的基于 OFI 的复合机制和电子碰撞机制实现台上 X 射线激光, 并且在这一领域已经取得巨大的进步^[3~11]。其中最突出的成果是美国 Stanford 大学的 Harris 研究小组于 1995 年成功地获得了 P-like Xe 41.8nm 的 X 射线激光放大, 增益长度积达到 11, 并且预言 Ni-like Kr (Kr IX) 系统也能产生很高的增益, 理论上的增益值可达 94cm^{-1} 。我们正在开展基于 OFI 电子碰撞机制 Ni-like Kr X 射线激光辐射理论和实验, 为寻求最佳的工作条件, 获取最佳的实验结果, 对基于 OFI 电子碰撞机制 Ni-like Kr X 射线激光辐射进

行理论研究是十分必要的。

1 类镍氙系统振子强度等原子参数的计算

为了验证所采用的微机版本 Cowan 程序计算结果的正确性, 我们对有实验结果的类钫氙 (Xe IX) 原子系统的部分能级能量值的计算结果与实验值进行比较并列于表 1 中, 由表 1 中用 Cowan 程序计算的结果与实验值比较说明, Cowan 程序的计算精度是相当高的。

Table 1 Comparison of experimental values and calculated values of a part of Xe IX energy-levels

levels	calculated values / cm^{-1}	experimental values / cm^{-1}	deviation / %
$4d^9 5p^{-1} P_1$	606211	604862	+ 0.22
$4d^9 5d^1 S_0$	845631	844000	+ 0.20
$4d^9 4f^1 P_1$	823766	832418	- 1.04
$4d^9 5f^1 P_1$	1040387	1040000	+ 0.04

对于类镍氙系统, 我们所要计算的原子参数主要包括类镍氙系统的能级、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。其中能级的能量值、振子强度、自发辐射衰变速率、跃迁波长、能级寿命等参数可直接由 Cowan 程序计算得出, 对于具体的计算结果在此就不一一列出。

* 国家八六三高技术计划激光技术主题、国家自然科学基金资助项目。

作者简介: 夏元钦, 男, 1968 年 7 月出生。讲师。现在从事超短脉冲激光驱动下的短波长激光及强激光场中原子电离工作。

收稿日期: 2001-11-16; 收到修改稿日期: 2001-03-16

2 电子碰撞激发速率系数的计算

由于电子碰撞激发速率与实际的电子能量分布密切相关,对于电子能量分布为 Maxwell 分布的平衡态系统,电子碰撞激发速率系数可由 Cowan 程序直接计算得出,而对于我们实际研究的飞秒激光脉冲驱动的基于 OFI 电子碰撞激发机制的类镍氦系统来说,其电子能量分布远不同于平衡态的 Maxwell 分布,因而电子碰撞激发速率系数不能由 Cowan 程序直接计算得出。但我们可以用 Cowan 程序计算出类镍氦系统平面波玻恩近似的电子碰撞强度 Ω_{ij} 的值,根据电子碰撞激发截面 $\sigma_{ou}(\epsilon)$ 与碰撞强度 Ω_{ij} 的关系式:

$$\Omega_{ij} = g_i k_i^2 \sigma_{ij} \quad (1)$$

式中, g_i 为初态的统计权重, k_i^2 为入射电子的能量 (Ry), 激发截面单位为 πa_0^2 。通过碰撞强度 Ω_{ij} 的值可以求得电子碰撞激发截面 $\sigma_{ou}(\epsilon)$ 的值,最后用截面 $\sigma_{ou}(\epsilon)$ 对电子能量分布函数 $f_e(\epsilon)$ 进行积分就得到电子碰撞激发速率系数 R_{ou} 。为此,我们在计算中自行编制了辅助程序将基于 Maxwell 平衡态分布函数进行计算的 Cowan 程序推广到适用于任意电子能量分布的情形。

2.1 Cowan 程序的推广及其正确性的验证

我们首先从 Cowan 程序的输出数据文件中提取相应的碰撞强度 Ω_{ij} 和电子能量 ϵ 的值,然后利用在 Matlab 环境下开发的一组程序对激发速率系数 R_{ou} 进行计算。为了验证将 Cowan 程序推广到适用于任意电子能量分布方法的正确性,我们对类钡氙 (XeIX) 系统 $4d^{10}1S_0 - 4d^95d^1S_0$, $4d^{10}1S_0 - 4d^95p^1P_1$ 和 $4d^95d^1S_0 - 4d^94f^1P_1$ 的不同能级之间,在电子温度为平衡态的 Maxwell 分布下的电子碰撞激发速率分别用 Cowan 程序和我们的处理方法进行了计算。

Table 2 The rate of electron-collisional excitation calculated with Cowan code and our program

levels	$4d^{10}1S_0 - 4d^95d^1S_0$		$4d^{10}1S_0 - 4d^95p^1P_1$		$4d^95d^1S_0 - 4d^94f^1P_1$	
T/eV	100	1000	100	1000	100	1000
$R_C / (cm^3 \cdot ns^{-1})$	2.1587	2.0959	2.4481	3.5926	54.472	24.879
$R_P / (cm^3 \cdot ns^{-1})$	2.1642	2.1010	2.4517	3.5956	54.595	22.287

在表 2 中,列出了分别利用 Cowan 程序和我们的自行开发的程序计算出的类钡氙 (XeIX) 系统在电子温度为 Maxwell 分布时的电子碰撞激发速率 R_C , R_P (其中下标 C 和 P 分别代表 Cowan 程序和我们的程序 Program), 其中 $4d^95d^1S_0 - 4d^94f^1P_1$ 电子温度为 1000eV 的数值相差较大,这是由于 Cowan 程序

的计算值中包含了 8.3% 的外推。通过计算结果的比较,说明我们所采用的处理方法是正确和有效的,由此得出的计算结果是可信的。

2.2 类镍氦系统电子碰撞激发速率系数的计算

验证了我们所采用的处理方法的正确性和有效性后,对类镍氦系统的电子碰撞激发截面和电子碰撞激发速率进行了计算。首先利用自行编制的程序对碰撞强度 Ω_{ij} 进行提取,然后根据 (1) 式计算出电子碰撞激发截面 $\sigma(\epsilon)$ 的值。表 3 和表 4 中分别给出了由类镍氦离子的基态 $3d^{10}1S_0$ 跃迁到部分单态能级和三重态能级的电子碰撞激发截面 $\sigma(\epsilon)$ 的值。

Table 3 The cross sections of electron-collisional excitation from ground state to singlet states

$3d^{10}1S_0 - 3d^94d^1S_0$		$3d^{10}1S_0 - 3d^94p^1P_1$		$3d^{10}1S_0 - 3d^94f^1P_1$	
$\epsilon(Ry)$	$\sigma(\epsilon) cm^2$	$\epsilon(Ry)$	$\sigma(\epsilon) cm^2$	$\epsilon(Ry)$	$\sigma(\epsilon) cm^2$
10.69	3.82E-18	7.81	2.24E-18	12.02	3.20E-18
14.64	2.84E-18	10.70	1.74E-18	16.46	2.50E-18
20.03	2.14E-18	14.64	1.43E-18	22.53	2.06E-18
27.42	1.62E-18	20.05	1.22E-18	30.84	1.77E-18
37.54	1.23E-18	27.45	1.06E-18	42.22	1.56E-18
51.38	9.36E-19	37.57	9.36E-19	57.79	1.38E-18
70.34	7.04E-19	51.43	8.12E-19	79.11	1.21E-18
96.29	5.26E-19	70.41	6.95E-19	108.29	1.05E-18
131.80	3.91E-19	96.38	5.85E-19	148.24	8.86E-19
180.42	2.89E-19	131.93	4.86E-19	202.92	7.41E-19
246.98	2.13E-19	180.60	3.98E-19	277.77	6.11E-19
338.08	1.56E-19	247.22	3.23E-19	380.23	4.98E-19
462.79	1.15E-19	338.41	2.59E-19	520.49	4.01E-19
633.50	8.44E-20	463.24	2.07E-19	712.48	3.21E-19
867.18	6.18E-20	634.12	1.64E-19	975.30	2.55E-19
1187.06	4.52E-20	868.03	1.29E-19	1335.06	2.01E-19
1624.93	3.31E-20	1188.22	1.01E-19	1827.52	1.58E-19
2224.32	2.42E-20	1626.52	7.88E-20	2501.64	1.23E-19
3044.81	1.77E-20	2226.50	6.12E-20	3424.41	9.62E-20
4167.94	1.29E-20	3047.78	4.73E-20	4687.57	7.45E-20
5705.37	9.45E-21	4172.02	3.65E-20	6416.67	5.76E-20
7809.90	6.91E-21	5710.94	2.81E-20	8783.58	4.43E-20

Table 4 The cross sections of electron-collisional excitation from ground state to triplet states

$3d^{10}1S_0 - 3d^94s^3D_2$		$3d^{10}1S_0 - 3d^94p^3P_1$		$3d^{10}1S_0 - 3d^94f^3P_1$	
$\epsilon(Ry)$	$\sigma(\epsilon) cm^2$	$\epsilon(Ry)$	$\sigma(\epsilon) cm^2$	$\epsilon(Ry)$	$\sigma(\epsilon) cm^2$
6.28	4.17E-19	7.72	3.23E-20	11.82	1.71E-20

continue table

$3d^{10} 1S_0 - 3d^9 4s^1 D_2$		$3d^{10} 1S_0 - 3d^9 4p^1 P_1$		$3d^{10} 1S_0 - 3d^9 4f^1 P_1$	
$\varepsilon(Ry)$	$\sigma(\varepsilon)cm^2$	$\varepsilon(Ry)$	$\sigma(\varepsilon)cm^2$	$\varepsilon(Ry)$	$\sigma(\varepsilon)cm^2$
8.60	3.09E-19	10.57	2.52E-20	16.18	1.34E-20
11.77	2.32E-19	14.47	2.06E-20	22.15	1.10E-20
16.11	1.76E-19	19.81	1.76E-20	30.32	9.49E-21
22.06	1.33E-19	27.12	1.54E-20	41.51	8.35E-21
30.20	1.00E-19	37.12	1.34E-20	56.82	7.37E-21
41.34	7.49E-20	50.82	1.16E-20	77.78	6.44E-21
56.59	5.56E-20	81.39	9.17E-21	106.47	5.55E-21
77.46	4.12E-20	111.41	7.67E-21	145.75	4.71E-21
106.04	3.03E-20	152.51	6.32E-21	199.51	3.93E-21
145.15	2.23E-20	208.77	5.15E-21	273.11	3.24E-21
198.70	1.64E-20	285.78	4.16E-21	373.85	2.64E-21
271.99	1.20E-20	391.20	3.32E-21	511.76	2.12E-21
372.33	8.81E-21	535.50	2.64E-21	700.53	1.70E-21
509.67	6.45E-21	733.04	2.08E-21	958.94	1.35E-21
697.67	4.72E-21	1003.43	1.63E-21	1312.66	1.06E-21
955.02	3.45E-21	1373.57	1.27E-21	1796.86	8.37E-22
1307.30	2.52E-21	1880.23	9.95E-22	2459.66	6.54E-22
1789.52	1.84E-21	2573.79	7.71E-22	3366.96	5.08E-22
2449.62	1.34E-21	3523.19	5.96E-22	4608.93	3.94E-22
3353.21	9.85E-22	4822.78	4.59E-22	6309.01	3.04E-22
4590.11	7.19E-22	6601.75	3.52E-22	8636.21	2.34E-22

从表 3 和表 4 中可以看到, 在电子能量相同的情况下, 由类镍氪离子的基态 $3d^{10}1S_0$ 跃迁到三重态能级的电子碰撞激发截面 $\sigma(\varepsilon)$ 比跃迁到单态能级的电子碰撞激发截面 $\sigma(\varepsilon)$ 小 1~2 个数量级, 所以, 对于我们所考虑类镍氪激光系统, 可以不考虑三重态能级的影响。在求得了电子碰撞激发截面 $\sigma(\varepsilon)$ 的值之后, 利用我们以前计算出的类镍氪系统的电子能量分布函数式^[11]:

$$\frac{dn(t)}{d\varepsilon(t)} = \frac{dn(t)}{dt} \left/ \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \right. = \frac{0.284 \sum_{j=1}^Z W_j(E(t)) \cdot \tau_p \cdot N_{j-1}(t)}{\varepsilon(t) \cdot \ln[1.76(t_{max} - t)/\tau_p]} \quad (2)$$

根据 $R = \int_{\Delta E}^{\infty} f_e(\varepsilon) \omega(\varepsilon) d\varepsilon$ 式中电子碰撞激发速率系数与电子碰撞激发截面及电子能量分布函数 $f_e(\varepsilon)$ 的关系得到电子碰撞激发速率系数的数值。在表 5 中给出了类镍氪系统有关跃迁的电子碰撞激发与消激发速率系数, 在表 6 中给出类镍氪系统有关跃迁的自发辐射衰减速率系数。

由于不考虑三重态能级的影响, 所以在表 5 和表 6 中, 仅给出了类镍氪系统单态能级间有关跃迁计算的参数。在表 7 中给出可由 Cowan 程序直接

计算得出的有关单态能级的数据, 其中的 E_1 (cm^{-1}), $\tau(s)$ 和 $\text{Sum } gA$ (s^{-1}) 分别表示能级的能量值、能级寿命和总自发辐射衰减速率。

Table 5 The rates of electron collisional excitation and depopulation of Kr IX

transition energy levels	$R / (cm^3 \cdot s^{-1})$
$3d^{10} 1S_0 - 3d^9 4s^1 D_2$	2.089×10^{-11}
$3d^{10} 1S_0 - 3d^9 4p^1 P_1$	1.055×10^{-10}
$3d^{10} 1S_0 - 3d^9 4d^1 S_0$	1.287×10^{-10}
$3d^{10} 1S_0 - 3d^9 4f^1 P_1$	1.715×10^{-10}
$3d^9 4d^1 S_0 - 3d^9 4f^1 P_1$	3.144×10^{-9}
$3d^9 4d^1 S_0 - 3d^9 4p^1 P_1$	8.257×10^{-10}
$3d^9 4p^1 P_1 - 3d^9 4s^1 D_2$	9.642×10^{-10}
$3d^9 4p^1 P_1 - 3d^{10} 1S_0$	3.516×10^{-11}

Table 6 The spontaneous decay rate coefficients of related transitions in Kr IX system

transition energy levels	A / s^{-1}
$3d^9 4f^1 P_1 - 3d^9 4d^1 S_0$	9.076×10^9
$3d^9 4f^1 P_1 - 3d^{10} 1S_0$	2.548×10^{12}
$3d^9 4d^1 S_0 - 3d^9 4p^1 P_1$	4.098×10^{10}
$3d^9 4p^1 P_1 - 3d^9 4s^1 D_2$	9.508×10^9
$3d^9 4p^1 P_1 - 3d^{10} 1S_0$	2.812×10^{11}

Table 7 Calculated values of relative energy levels in Kr IX system

No.	levels	E_1 / cm^{-1}	τ / s	$\text{Sum } gA / s^{-1}$
5	$3d^9 4f^1 P_1$	1317540	1.153×10^{-12}	2.603×10^{12}
4	$3d^9 4d^1 S_0$	1171278	2.014×10^{-11}	4.965×10^{10}
3	$3d^9 4p^1 P_1$	855981	1.014×10^{-11}	2.958×10^{11}
2	$3d^9 4s^1 D_2$	698055	9.995×10^{33}	0
1	$3d^{10} 1S_0$	-1894	9.995×10^{33}	0

根据计算出的类镍氪系统的有关能级的数值, 我们可以作出类镍氪系统简化的能级图。图中虚线表示电子碰撞引起的跃迁, 实线表示辐射跃迁。

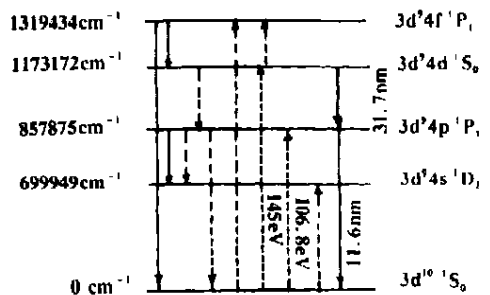


Fig. 1 The brief energy-level diagram of Kr IX

(下转第 137 页)

PID 调节的表达式。

在我们的系统中, 被控对象(压力)的变化过程比较缓慢, 当系统启动和停止时, 由于积分项的作用, 将会产生 1 个很大的超调量。即产生积分饱和现象, 使系统出现严重振荡。因此, 我们采用了积分分离的 PID 算法, 即在控制量开始跟踪时, 取消积分作用, 直至被调量(压力)接近给定值时, 才产生积分作用。

设给定值为 $V(R)$, 经误差修正后的测量值为 $V_i(n)$, 最大允许偏差值为 A , 则积分分离控制的算法为: 当 $e(n) = |V_i(n) - V(R)| =$

$$\begin{cases} > A, & \text{为 PD 控制} \\ \leq A, & \text{为 PID 控制。} \end{cases}$$

PD 控制的算法为:

$$P(n) = P(n-1) + K_P[e(n) - e(n-1)] + K_D[e(n) - 2e(n-1) + e(n-2)] \quad (5)$$

采用积分分离的 PID 方法, 可显著降低被控制量的超调量和过渡时间, 使控制器性能得到改善。

3.2 PID 算法程序设计

PID, PD 输出时的编程表达式分别为:

$$P(k) = P_P(k) + P_I(k) + P_D(k) \quad (6)$$

$$P(k) = P_P(k) + P_D(k) \quad (7)$$

根据对系统的整体测试, 我们采用扩充响应曲线法进行了参数整定, 最后确定了本压力控制系统

的参数: $T = 5s, K_P = 1.27, K_I = 0.025, K_D = 2.74$ 。

图 4 为压力控制子系统的程序流程图。设激光器工作气压为 $V_R = 0.15 \times 10^5 \text{Pa}$ 为给定值, 气压取样值为 V_X , 控制输出为充气电磁阀的开启脉冲宽度 $T_X(\text{ms})$, 积分分离的最小误差值设为 $V_R = 1\text{kPa}$ 。

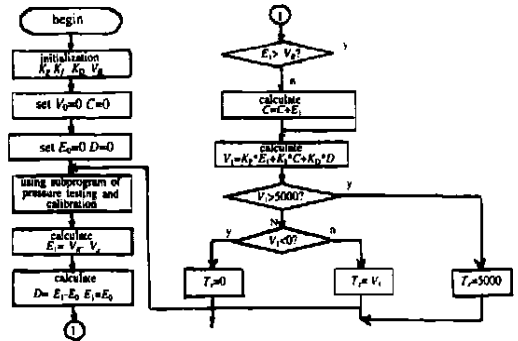


Fig. 4 Flow chart of gas pressure control with PID

4 实验结果及小结

我们未涉及压力测量与误差修正的具体实现过程, 在该系统中采用硅压力传感进行气压控制后, 用软件实现温漂补偿。该系统的压力控制精度在 200Pa 左右, 激光功率波动约为 1%, 很好地满足了高精度切割要求。

参 考 文 献

[1] 李适民. 激光器件原理与设计. 武汉: 华中理工大学, 1994.

[2] Bumett N H, Corkum P B. J O S A, 1989, B6(6): 1195~ 1199.

[3] Nagata Y, Midorikawa K, Kubodera S *et al.* Phys Rev Lett, 1993, 71(23): 3774~ 3777.

[4] Lemoff B E, Barty C P J, Harris S E. Opt Lett, 1994, 19 (8): 569~ 571.

[5] Lemoff B E, Yin G Y, Gordon C L *et al.* Phys Rev Lett, 1995, 74(9): 1574~ 1577.

[6] Fill E, Borgstrom S, Larsson J *et al.* Phys Rev, 1995, E51(6): 6016~ 6027.

[7] Lu P, Nakano H, Nishikawa T *et al.* Calculations of Ionization Process and Gain for a Circularly Polarized 1TW/100fs Laser Driven Nickel-like Krypton X-ray Laser. The Autumn Meeting of the Physical Society of Japan. Okinawa International Uni, 1998.

[8] Lu P, Nakano H, Tadashi N *et al.* Proc SPIE, 1999 3886: 2000.

[9] Donnelly T D, Lee R W, Falcone R W. Phys Rev, 1995, A51(4): R2691~ R2694.

[10] Chichkov B N, Momma C, Tunneman A. A P L, 1996, 68 (20): 2804~ 2806.

[11] 陈德应, 卢兴发, 夏元钦 *et al.* 光学学报, 1999, 19(7): 884~ 888.

上接第(131 页)

4 结 论

我们利用 Cowan 程序最新的微型机版本将原来仅以麦克斯韦分布为基础的 Cowan 程序推广到适用于任意电子能量分布的情形, 对类镍氦系统的原子参数进行了计算, 给出了类镍氦系统简化的能级图, 为进一步的理论和实验工作奠定基础。我们计算的该跃迁波长为 31.7nm, 与美国 Stanford 大学的 Lemoff 等人^[4] 计算的由 3d⁹4d¹S₀ 能级到 3d⁹4p¹P₁ 能级跃迁波长 31.9nm 相比, 结果略有不同, 可能由于不同的计算方法及精度等方面的原因造成的, 需要以后的实验来检验。

参 考 文 献

[1] Corkum P B, Burnett N H. OSA Proceedings Series, 1988, 2: 225.