

文章编号: 1001- 4322(2001)02- 0186- 05

# Au 激光等离子体 $0.3 \sim 0.4 \mu\text{m}$ X 射线发射谱模拟\*

张继彦<sup>1,2</sup>, 杨国洪<sup>1</sup>, 张保汉<sup>1</sup>, 杨向东<sup>2</sup>,  
周裕清<sup>1</sup>, 雷安乐<sup>1</sup>, 刘宏杰<sup>1</sup>, 李 军<sup>1</sup>, 杨家敏<sup>1</sup>, 丁耀南<sup>1</sup>

(1. 中国工程物理研究院 高温高密度等离子体物理国家重点实验室 四川 绵阳 621900;

2. 四川大学 原子与分子物理研究所, 四川 成都 610064)

**摘 要:** 应用自旋-轨道劈裂不可分辨跃迁组理论对高离化 Au 元素激光等离子体  $0.3 \sim 0.4 \mu\text{m}$  范围的 X 射线发射谱进行了分析。采用单温局域热动平衡近似, 对实验谱进行理论模拟, 并根据不可分辨跃迁组强度比得到等离子体的电子温度。

**关键词:** Au 激光等离子体; 不可分辨跃迁组; 光谱模拟; 自旋-轨道劈裂

**中图分类号:** O536; O562.3

**文献标识码:** A

由于在惯性约束聚变实验中的等离子体诊断以及 X 射线激光领域可能存在的良好应用前景, 高离化高  $Z$  元素 X 射线发射谱引起了人们的兴趣<sup>[1~4]</sup>。在最初的一些研究中, 由于对重元素复杂光谱的产生机制缺乏认识, 以及没有适当的理论模型, 在光谱辨识方面曾发生过一些严重错误。例如, Kiyokawa 等人曾将高离化 Au 等离子体在  $3.0 \sim 4.0 \text{keV}$  范围的发射谱误认为属于从  $\text{Au}^{26+}$  到  $\text{Au}^{32+}$  离子的内壳层多重空穴态跃迁。这一错误直到后来不可分辨跃迁组理论成功应用于重元素高荷电离子发射谱的分析之后才得到纠正。多年来, 人们在重元素高荷电离子发射谱中往往发现这样一些特征, 即在光谱中除少数几条共振跃迁线能分辨外, 大多表现为不可分辨的连续或半连续带状结构。为了对这种带谱结构进行解释, C. Bauche-Arnoult 等人首先提出了不可分辨跃迁组(UTA)理论<sup>[5,6]</sup>。该理论认为, 在高离化态重原子中由于发生光谱跃迁的两电子组态间众多跃迁线非常靠近, 再加上各种展宽效应(如 Stark 展宽, Doppler 展宽, 等离子体的自吸收效应及碰撞展宽等)以及光谱仪器有限的分辨能力等因素而融合成不可分辨的谱带, 这样一个不可分辨的谱带就是一个不可分辨跃迁组。在该理论中, 用跃迁组的权重强度分布来描述不可分辨跃迁组, 并分别给出了这些跃迁组的平均波数和方差的解析表达式。1985 年, C. Bauche-Arnoult 等进一步发展了 UTA 模型, 提出了自旋-轨道劈裂不可分辨跃迁组(SOSA)模型, 对重元素不可分辨跃迁组的自旋-轨道劈裂现象进行了成功的解释。1986 年, A. Ziegler 和 M. Klapisch 等应用自旋-轨道劈裂跃迁组模型对 Au 元素和 W 元素激光等离子体  $3 \text{keV}$  区 X 射线发射谱进行了分析和辨认<sup>[7]</sup>, 理论计算结果和实验符合得很好。同年, 应用自旋轨道劈裂跃迁组模型, C. Bauche-Arnoult 等对 Au 激光等离子体  $3.0 \sim 4.0 \text{keV}$  范围 X 射线发射谱进行了重新分析, 得出该段发射谱应属于  $\text{Au}^{48+}$ - $\text{Au}^{52+}$  离子的  $3d-5f$  和  $3d-6f$  跃迁组。

研究表明, 在 Au 元素高荷电离子发射谱的  $0.3 \sim 0.4 \mu\text{m}$  波段, 光谱呈典型的半连续带状结构, 而且该段光谱中属于不同离子的发射谱良好分开, 因此在等离子体诊断方面特别有用。我们应用自旋-轨道劈裂不可分辨跃迁组模型, 在单温局域热动平衡近似下, 对  $0.3 \sim 0.4 \mu\text{m}$  范围实验谱进行了理论模拟; 同时, 应用类 Cu 离子  $3d-5f$  与  $3d-6f$  不可分辨跃迁组强度比给出等离子体电子温度并与由类 Ni 离子的  $3d-5f$  与  $3d-6f$  共振跃迁线强度比诊断得出的结果进行比较。

\* 收稿日期: 2000-12-09; 修订日期: 2001-02-21

基金项目: 国家自然科学基金资助课题(1967409-GJ401); 中国工程物理研究院预研基金资助课题(20000216)

作者简介: 张继彦(1971-), 男, 助研, 从事原子分子碰撞理论及等离子体物理研究, 绵阳 919-986 信箱。

### 1 实验

实验中,通过聚焦一束能量为 12J、脉宽约为 800ps 的三倍频激光(0.35μm)于真空靶室内的 Au 平面微点靶表面产生激光等离子体,形成了高剥离态热等离子体光源。靶直径小于 0.6mm,靶的纯度为 99.99%,激光焦斑直径 200~250μm。用 PET(2d=0.8742nm)平晶谱仪对 0.30~0.65nm 波长范围内软 X 射线发射谱进行分光,并采用天津 N-III 型 X 射线胶片进行时间积分记录。记录于 X 光胶片的实验谱经黑密度计扫描得到位置-黑密度曲线,然后根据胶片的光强-黑密度敏感特性<sup>[8]</sup>对实验谱相对强度进行了校正。校正后的实验谱经处理后得到的波长-相对强度曲线如图 1 所示。经分析辨认可知,实验谱分别属于从 Au<sup>47+</sup> 到 Au<sup>53+</sup> 离子的 3d-7f, 3d-6f, 3d-5f, 3d-5p, 3p-4d, 3d-4f, 3p-4s 和 3d-4p 跃迁。从实验谱中可以看到 3p-4d 和 3p-4s 跃迁光谱呈连续宽带结构,其上叠加有少数几条可辨认谱线。另外,3d-4f 跃迁也有类似情形,只是这些光谱因强度太高使感光胶片黑密度饱和而几乎呈完全连续状,已无线谱可以分辨。本文作者之一已经对上述光谱细致结构进行了辨认和分析,其详细辨识结果见文献[9]。

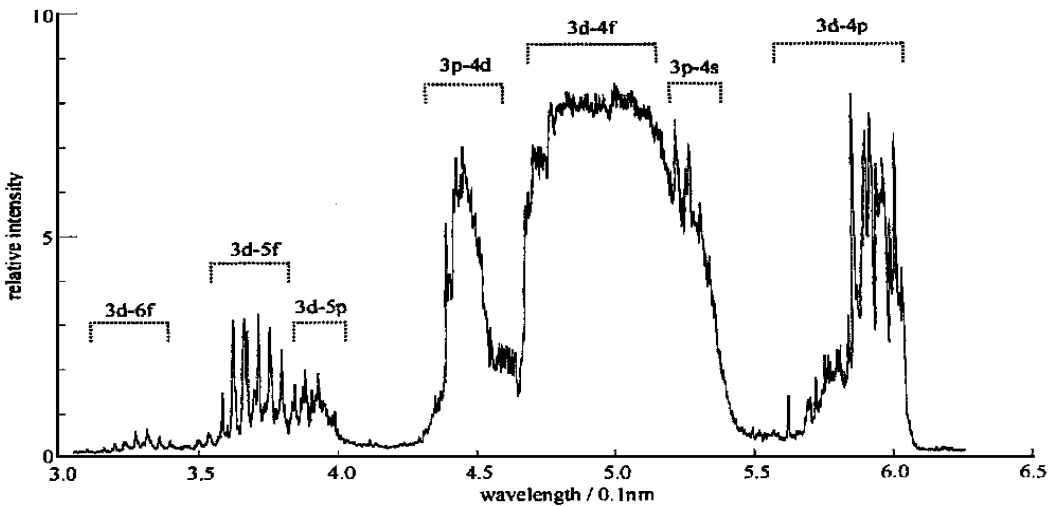


Fig 1 X-ray spectrum emitted from laser-produced plasma of Au  
图 1 金激光等离子体 X 射线发射谱

### 2 理论计算

在理论计算中,我们采用 J. Bauche 等人推导的关于自旋-轨道劈裂不可分辨跃迁组各阶分布矩的解析计算公式,计算了 3d-nf (n= 5, 6, 7) 类镍及其附近等电子序列离子的  $(nlj)^{N+1}-(nlj)^N n' l' j'$ 、 $(nlj)^N n' l' j'-(nlj)^N n'' l'' j''$  和  $(nl)^N n' l' j'-(nl)^N n'' l'' j''$  类型的  $jj'$  跃迁带的平均波长( $\lambda$ )和半高全宽度(FWHM)。其中所涉及到的电子对库仑积分  $F^K$ 、交换积分  $G^K$  以及相对论组态平均能,国外均采用相对论多参数势方法(RELAC)得到<sup>[10,11]</sup>。由于国内尚未建立该程序,我们采用多组态 Dirac-Fock 程序包<sup>[12]</sup>(MCDHF)计算得到。对于从类 Ni 到类 Ge 的各阶离子的电子组态,只考虑存在 4l (l= s, p, d, f) 旁观电子的情形,即对类 Cu 离子取旁观电子 4s, 4p, 4d, 4f, 对类 Zn 离子取 4s4p, 4s4d, 4s4f, 4p<sup>2</sup>, 4p4d, 4p4f, 4d<sup>2</sup>, 4d4f, 4f<sup>2</sup>, 对类 Ga 离子取 4s<sup>2</sup>4p, 4s<sup>2</sup>4d, 4s<sup>2</sup>4f, 4s4p<sup>2</sup>, 4s4p4d, 4s4p4f, 对类 Ge 离子取 4s<sup>2</sup>4p<sup>2</sup>, 4s<sup>2</sup>4p4d, 4s<sup>2</sup>4p4f, 4s<sup>2</sup>4p<sup>2</sup>, 4s<sup>2</sup>4p4d, 4s<sup>2</sup>4p4f, 4s<sup>2</sup>4d<sup>2</sup>, 4s<sup>2</sup>4d4f, 4s4p<sup>3</sup>, 4s4p<sup>2</sup>4d, 4s4p<sup>2</sup>4f。实验谱上的每一可观测跃迁峰是所有相应次跃迁组的叠加。对类 Cu 离子的 3d-5f 跃迁,叠加结果如表 1 所示。为了计算每一可观测峰的半高全宽度,我们假设所有的次跃迁组对应的跃迁峰为高斯型,然后计算这些高斯函数叠加后叠加峰的半高全宽。这里,当对体系采用单温局域热动平衡近似时,则每一跃迁次组的总强度应与其总跃迁几率  $K$  和 Boltzmann 因子之积成正比,也即

$$I \propto K \exp[-\Delta E/T_e] \tag{1}$$

表 1 Au<sup>50+</sup> 离子 3d- 5f 跃迁次组中心波长及半高全宽度理论计算结果。其中考虑了  
对应各 4l<sub>j</sub> 旁观电子的 7 个跃迁次组及其叠加峰

Table 1 Results of the calculations of the positions and widths of the subarrays belonging to  
the Au<sup>50+</sup> spectrum. Seven subarrays have been considered, corresponding to the various 4l<sub>j</sub> spectator electrons added

spectator electrons	3d <sub>3/2</sub> -5f <sub>5/2</sub>		3d <sub>3/2</sub> -f <sub>7/2</sub>	
	$\lambda_{\text{mean}}/\text{\AA}$ 1nm	FWHM / $\text{\AA}$ 1nm	$\lambda_{\text{mean}}/\text{\AA}$ 1nm	FWHM / $\text{\AA}$ 1nm
4s <sub>1/2</sub>	3 625	0 0075	3 721	0 0077
4p <sub>1/2</sub>	3 626	0 0080	3 723	0 0075
4p <sub>3/2</sub>	3 623	0 0080	3 719	0 0084
4d <sub>3/2</sub>	3 625	0 0185	3 723	0 0080
4d <sub>5/2</sub>	3 626	0 0084	3 721	0 0195
4f <sub>5/2</sub>	3 628	0 0185	3 726	0 0084
4f <sub>7/2</sub>	3 630	0 0089	3 724	0 0185
resultant peak	3 625	0 010	3 721	0 011

这里  $\Delta E$  表示跃迁带上组态平均能与基组态平均能之差,  $T_e$  表示电子温度。另外, 上式中的总跃迁几率  $K$  可采用 C. Bauche-Arnoult 等人给出的解析公式求得<sup>[6]</sup>。这样, 按照单温局域热动平衡近似, 可将两跃迁次组的总强度比表示为

$$r = K (3d_{3/2}-5f_{5/2}) \exp(-\Delta E_{5f_{5/2}}/T_e) / K (3d_{3/2}-6f_{5/2}) \exp(-\Delta E_{6f_{5/2}}/T_e) \quad (2)$$

对于共振线强度比<sup>[13, 14]</sup>, 只需将上式中的总跃迁几率换成对应的线跃迁几率则可。

在表 2 中我们给出了从类 Ni 到类 Ge 离子的 3d-5f 和 3d-6f 跃迁组中心波长, 半高全宽度的理论计算结果和对应的实验测量数据(表中所给跃迁组半高全宽度包含了类 Ni 离子 3d-5f 共振线半宽度(FWHM) 0.00073nm)。其中对类 Cu 离子的计算选取了 7 个次组态, 对类 Zn 离子选取了 22 个次组态, 而对类 Ga 离子和类 Ge 离子则分别选取了 55 个和 75 个次组态。

表 2 Au 激光等离子体 3d-5f, 6f 跃迁组的理论计算结果

Table 2 Results of the calculations of the positions and widths  
of the 3d-5f, 6f transition arrays of laser-produced Au plasma

3d-5f				3d-6f			
ions	transitions $j-j'$	$\lambda_{\text{mean}}/\text{\AA}$ 1nm	FWHM / $\text{\AA}$ 1nm	ions	transitions $j-j'$	$\lambda_{\text{mean}}/\text{\AA}$ 1nm	FWHM / $\text{\AA}$ 1nm
Au <sup>52+</sup>	3/2-5/2	3 589		Au <sup>52+</sup>	3/2-5/2	3 158	
Au <sup>52+</sup>	5/2-7/2	3 683		Au <sup>52+</sup>	5/2-7/2	3 233	
Au <sup>51+</sup>	3/2-5/2	3 625	0 010	Au <sup>51+</sup>	3/2-5/2	3 198	0 010
Au <sup>51+</sup>	5/2-7/2	3 721	0 011	Au <sup>51+</sup>	5/2-7/2	3 274	0 010
Au <sup>50+</sup>	3/2-5/2	3 663	0 014	Au <sup>50+</sup>	3/2-5/2	3 238	0 012
Au <sup>50+</sup>	5/2-7/2	3 760	0 015	Au <sup>50+</sup>	5/2-7/2	3 316	0 013
Au <sup>49+</sup>	3/2-5/2	3 699	0 015	Au <sup>49+</sup>	3/2-5/2	3 279	0 013
Au <sup>49+</sup>	5/2-7/2	3 799	0 017	Au <sup>49+</sup>	5/2-7/2	3 358	0 015
Au <sup>48+</sup>	3/2-5/2	3 737	0 017	Au <sup>48+</sup>	3/2-5/2	3 320	0 014
Au <sup>48+</sup>	5/2-7/2	3 838	0 018	Au <sup>48+</sup>	5/2-7/2	3 402	0 017

### 3 结果与讨论

根据自旋-轨道劈裂不可分辨跃迁组理论和单温局域热动平衡近似, 我们计算了 3d-5f 与 3d-6f 跃迁的共振线强度比及其类 Cu 离子跃迁次组的总强度比, 其结果如图 2 所示。

按照 A. Zigler 等人的研究<sup>[15]</sup>, 跃迁组的实验强度应扣除光谱中的连续成分, 仅取叠加于其上的峰面积。这样, 我们得到类 Cu 离子 3d<sub>3/2</sub>-5f<sub>5/2</sub> 与 3d<sub>3/2</sub>-6f<sub>5/2</sub> 跃迁组的实验强度比约为  $13.0 \pm 2.0$ , 类 Ni 离子 3d<sub>3/2</sub>-5f<sub>5/2</sub> 与 3d<sub>3/2</sub>-6f<sub>5/2</sub> 共振跃迁线强度比约为  $10.0 \pm 2.0$ 。通过与对应的理论温度-强度比曲线对比, 可以得出等离子体电子温度在 250~ 350eV 之间。

在图 3 中我们给出了实验测得的 3d-5f, 3d-6f 跃迁发射谱和电子温度  $T_e = 300\text{eV}$  时对应的理论模

拟结果。在理论光谱计算中, 将各离化阶基态离子丰度作为自由参数, 并根据实验谱对其进行拟合。

与经典的用线强度比诊断的方法不同, 采用重原子跃迁组进行等离子体温度诊断有许多优点。一方面, 它可以大大降低对谱仪分辨率的要求, 因而可以设计相对简单和紧凑的时空分辨谱仪系统; 另一方面, 在不可分辨跃迁组理论中要处理的光谱元素是组态或次组态而非细节能级, 因而在计算方面相对容易一些。在处理关于激发态占据机制问题时, 本文中作为一种初步尝试, 假设等离子体满足局域热动平衡近似。这样, 等离子体中同种离子的各能级上的电子占据服从 Boltzmann 分布。但一般来说, 由于在激光打靶过程中激光能量在靶表面的沉淀使等离子体往往偏离局域热动平衡状态, 因而要对激光等离子体状态进行准确描述通常应采用碰撞-辐射模型, 即要考虑等离子体中可能存在的每种离化阶离

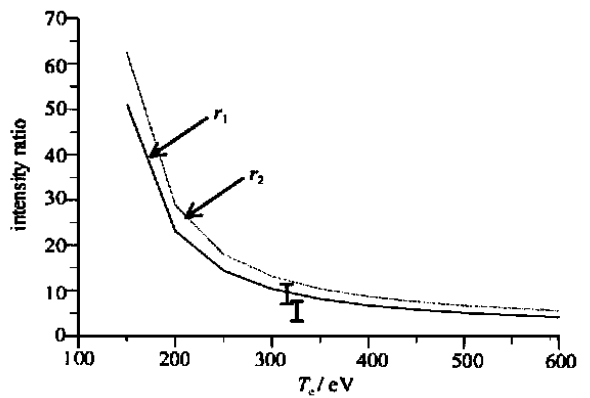


Fig 2 Curves of intensity ratio vs electron temperature The solid line  $r_1$  and dash line  $r_2$  correspond to the intensity ratios between  $3d_{3/2}-5f_{5/2}$  and  $3d_{3/2}-6f_{5/2}$  transitions of Ni-like and Cu-like ions respectively.

图 2 Au 激光等离子体  $3d_{3/2}-5f_{5/2}$  与  $3d_{3/2}-6f_{5/2}$  跃迁强度比。图中实线  $r_1$  和虚线  $r_2$  分别为类 Ni 和类 Cu 离子的对应跃迁强度比

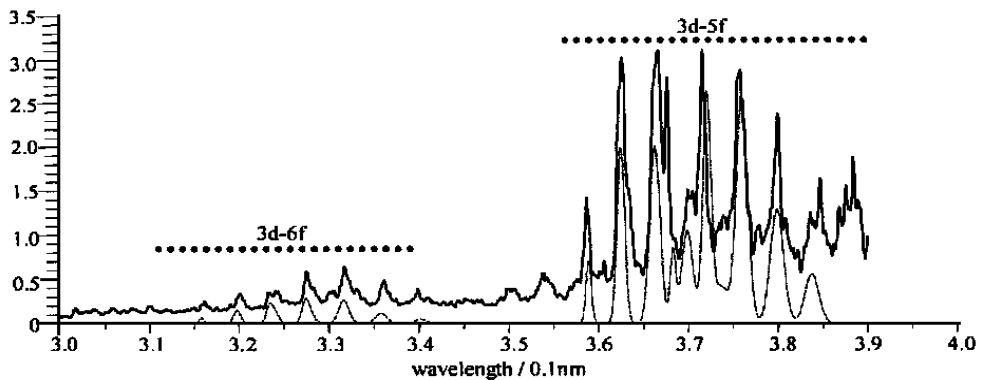


Fig 3 Theoretical modeling of the  $3d-5f$  and  $3d-6f$  transitions of spectrum: dash line denotes the theoretical model line 图 3 对金激光等离子体  $3d-5f$ ,  $3d-6f$  跃迁的光谱模拟。图中实线为实验谱, 虚线为理论模拟谱。

子及其所有能级通过各种原子物理过程实现的电子占据与衰减。对于高 Z 元素激光等离子体, 在采用关于能级的碰撞-辐射模型时, 由于所涉及的能级数量众多, 因而速率方程组维数特别大, 即使采用最先进的计算机也很难精确求解。但如果采用不可分辨跃迁组模型, 由于仅需考虑组态的占据问题, 使得问题大为简化, 因而对基于组态的碰撞-辐射模型的求解是有可能的, 但直到目前为止, 国际上在这方面的的工作仍处于探索阶段<sup>[16]</sup>。

通常认为<sup>[17]</sup>, 采用局域热动平衡近似得出的等离子体电子温度偏低。由于本文中所用实验光谱为时间和空间积分谱, 我们采用了共振线强度比诊断法来验证由跃迁组强度比得出的电子温度仅是对两种方法自洽性的考查, 并不是对诊断结果进行精确性检验。对本文所述诊断方法的近一步考查和检验, 一方面需要有时空分辨谱, 另一方面还要建立对等离子体平衡状态进行精确描述的碰撞-辐射模型。另外, 由于采用了微点靶技术, 我们忽略了等离子体对其发射线的自吸收效应。实际上, 要进行精确的光谱诊断还应考虑等离子体对光谱线的吸收, 也即光性厚的影响。

参考文献:

[1] Burkhalter P G, Dozier C M, Nagel D J. X-ray spectra from exploded-wire plasmas[J]. *Phys Rev*, 1977, A 15: 700-717.

[2] Kiyokawa S, Yabe T, Miganaga N, et al. Multiple inner-shell vacancies in laser-irradiated Au plasmas[J]. *Phys Rev Lett*, 1985, 54: 1999-2002.

[3] Bauche-Arnoult C, Luc-Koenig E, Wiyart J-F, et al. Interpretation of the spectra of a laser-irradiated Au plasma in the 0.3~0.4 nm range.

- 4nm range[J]. *Phys Rev*, 1986, **A33**: 791-793
- [4] 雷安乐, 周裕清, 张保汉, 等. 类镍离子(HfXLV-ReXLV III)能级和振子强度的理论计算[J]. 强激光与粒子束, 1996, **8**(1): 57-60  
[Lei A L, Zhou Y Q, Zhang B H, et al. The calculation of energy levels and oscillator strengths for Ni-like ions from HfXLV to ReXLV III. *High power laser and particle beams*, 1996, **8**(1): 57-60](in Chinese)
- [5] Bauche-Arnoult C, Bauche J, Klapisch M, et al. Variance of the distributions of energy levels and of the transition arrays in atomic spectra[J]. *Phys Rev*, 1979, **A20**: 2424-2439
- [6] Bauche-Arnoult C, Bauche J, Klapisch M, et al. Variance of the distributions of energy levels and of the transition arrays in atomic spectra. III Case of spin-orbit-split arrays[J]. *Phys Rev*, 1985, **A31**: 2248-2259
- [7] Zigler A, Klapisch M, Mandelbaum P. Interpretation of laser produced Au and W X-ray spectra in the 3keV range[J]. *Phys Lett*, 1986, **A117**: 31-35
- [8] 杨家敏, 易荣清, 陈正林. 5FW 软 X 光胶片响应在同步辐射源上的实验标定[J]. 强激光与粒子束, 1998, **10**(1): 131-134  
[Yang J M, Yi R Q, Chen Z L, Experimental calibration of response curves for soft X-ray film 5FW on synchrotron radiation. *High power laser and particle beams*, 1998, **10**(1): 131-134](in Chinese)
- [9] 杨国洪, 张继彦, 张保汉, 等. 金激光等离子体 X 射线精细结构谱研究[J]. 物理学报, 2000, **49**(12): 2389-2393  
[Yang G H, Zhang J Y, Zhang B H, et al. Analysis of fine structure of X-ray spectra from laser-irradiated gold dot. *Acta Physica Sinica*, 2000, **49**: 2389-2393](in Chinese).
- [10] Luc-Koenig E. Fonctions d'onde atomiques relativistes dans l'approximation du champ central[J]. *Physica (Utrecht)*, 1972, **62**: 393-408
- [11] Klapisch M, Schwob J-L, Fraenkel B S, et al. The 1s-3p K $\beta$ -like X-ray spectrum of highly ionized iron[J]. *J Opt Soc Am*, 1977, **67**: 148-155
- [12] Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H, et al. An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package[J]. *Computer Physics Communications*, 1980, **21**: 207-231
- [13] 沈百飞, 张杰, 韩申生, 等. 用共振线强度比作激光等离子体诊断[J]. 光学学报, 1995, **15**(6): 712-714  
[Shen Baifei, Zhang Jie, Han Shensheng, et al. Diagnoses of laser-produced plasma with intensity ratio of resonance lines. *Acta Optica Sinica*, 1995, **15**(6): 712-714](in Chinese).
- [14] 林晓东. 用同电离态离子的光谱线对测量等离子体温度[J]. 强激光与粒子束, 2000, **12**(3): 351-354  
[Lin X D, Utilize the spectral line pair of the same ionized state ion to measure the ion temperature of Tokamak plasma. *High power laser and particle beam*, 2000, **12**(3): 351-354](in Chinese)
- [15] Zigler A, Given M, Yarkoni E, et al. Use of unresolved transition arrays for plasma diagnostics[J]. *Phys Rev*, 1987, **A35**: 280-285
- [16] Bar-Shalom A, Oreg J, Klapisch M. Collisional radiative model for heavy atoms in hot non-local-thermodynamical-equilibrium plasmas[J]. *Phys Rev*, 1997, **E56**: 70-73
- [17] Bauche J, Bauche-Arnoult C, Klapisch M. Transition arrays in the spectra of ionized atoms[J]. *Advances in Atomic and Molecular Physics*, 1988, **23**: 131-195

## Modeling the spectra of laser-produced Au plasmas in the range 0.3-0.4nm

ZHANG Jiryan<sup>1,2</sup>, YANG Guo-hong<sup>1</sup>, ZHANG Bao-han<sup>1</sup>, YANG Xiang-dong<sup>2</sup>, ZHOU Yu-qing<sup>1</sup>,  
LEI An-le<sup>1</sup>, LU Hong-jie<sup>1</sup>, LI Jun<sup>1</sup>, YANG Jiaming<sup>1</sup>, DING Yao-nan<sup>1</sup>

(1. National Key Laboratory of Laser Fusion, CAEP, P. O. Box 919-986, Mianyang 621900, China;

2. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

**Abstract** The X-ray spectra emitted from laser-produced Au plasmas in the range 0.3~0.4nm are analyzed and interpreted by using the Spin-Orbit-Split Array model. The plasmas are created by using a beam of a frequency-tripled 1.05 $\mu$ m Nd-glass laser focused onto a microdot target of gold. The pulse width was 800ps and the laser energy is about 12J. The emitted X-ray is analyzed by a pentaerythritol (PET) crystal spectrograph and recorded on Tianjing New-III X-ray films. On the assumption of the mono-temperated local-thermodynamical-equilibrium approximation, the electronic temperature is obtained from the intensity ratio of two unresolved transition arrays, and the experimental spectra is simulated.

**Key words** laser-produced Au plasmas; unresolved transition arrays; spectral simulation