

氖原子对 2000 eV X 射线激光透明的产生机制

冯雷 蒋刚

2000 eV X-ray laser transparent mechanism of neon atom

Feng Lei Jiang Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 153201 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.153201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.153201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I15>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

氖原子光电子角分布的理论计算

Theoretical calculation of the photoelectron angular distribution of neon

物理学报.2016, 65(8): 083201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.083201>

铯原子气室中相干布居俘获的参数依赖关系研究

Investigation of experimental parameters of coherent population trapping with cesium vapor cell

物理学报.2012, 61(23): 233201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.233201>

氙原子对2000 eV X射线激光透明的产生机制*

冯雷¹⁾³⁾ 蒋刚^{2)3)†}

1)(四川大学物理科学与技术学院, 成都 610065)

2)(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

3)(四川大学, 高能密度物理及技术教育部重点实验室, 成都 610065)

(2017年4月5日收到; 2017年5月25日收到修改稿)

X射线自由电子激光与物质相互作用时出现了X射线透明现象, 研究X射线透明现象的产生机制对理解X射线自由电子激光与物质相互作用过程具有重要参考价值. 本文基于FAC (Flexible Atomic Code) 程序计算的氙原子(离子)对2000 eV X射线的光电离截面和俄歇衰变速率, 确定了不同通量密度下氙原子的主要电离方式; 通过建立和解速率方程, 得到了确定的电离方式中氙元素各电子组态数目比例随时间变化的公式, 计算了氙原子在通量密度为2000和10000 $\text{\AA}^{-2}\cdot\text{fs}^{-1}$ 、持续时间为20 fs、光子能量为2000 eV的X射线激光照射下, 任意时刻各主要电子组态的原子数目比例和总的氙原子平均光电离截面. 建立了价电子完整的空心原子的数目比例随通量密度和曝光时间变化的公式. 发现裸核和空心原子都会导致X射线透明, 且选择恰当的通量密度和脉冲持续时间可以使价电子完整的空心原子数目比例达到极高.

关键词: X射线透明, X射线自由电子激光, 空心原子, 氙

PACS: 32.80.Hd, 32.80.Aa, 32.80.Hd

DOI: 10.7498/aps.66.153201

1 引言

X射线自由电子激光器作为第四代先进光源^[1], 具有相干性好、亮度高、强度大等优点, 为研究物质科学提供了前所未有的条件和机遇, 给了我们在埃米空间尺度和飞秒时间尺度下探讨原子和分子系统的结构和动力学过程的可能性. X射线自由电子激光与物质相互作用时出现了许多奇异的物理现象, 如非线性X射线光学效应^[2]、饱和吸收效应^[3]、X射线透明^[4]和空心原子(hollow atom)^[5]等. 另外X射线自由电子激光有一项很重要的应用, 即用于测定生物分子结构, 称为串行飞秒晶体学^[6,7]. 相对于传统光源, 使用X射线自由电子激光测定分子结构时, 对生物分子晶体尺寸的要求大大降低, 避免了晶体生长的难题^[8,9]. 在文献^[5]的描述中, 2000 eV的X射线自由电子激光与

氙原子相互作用时出现了X射线透明现象. 文中认为X射线透明的原因是连续的内壳层光电离过程产生的空心原子, 因为对于2000 eV的激光, 氙原子(离子)的光吸收主要表现为1s壳层电子的光电离, 而空心氙原子没有1s壳层电子, 这样当空心氙原子产生时, X射线无法被吸收, 从而出现透明现象. 此外空心原子也产生于X射线自由电子激光衍射成像中^[10]. 文献^[9]中提到, 对于高能X射线, 其吸收截面远大于散射截面. 所以如果在衍射成像过程中材料对X射线透明, 会使得更多的光子用于衍射, 若此刻样品的微观结构未被破坏, 则将获得较清晰的衍射图样. 据此, 本文研究氙原子对2000 eV X射线激光透明现象的具体成因, 并讨论能否在较少氙离子失去价电子的情况下产生X射线透明.

光的吸收现象是由光与物质的相互作用引起的, 物质吸收一个光子实质上是光子消耗自身将一

* 国家自然科学基金(批准号: 11474208)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gjiang@scu.edu.cn

个电子从能量较小的态激发到能量较高的态上. 氖原子最大的电离能为 1360 eV [5], 能量大于 1360 eV 的光子会将氖原子的内部电子激发到原子外部, 成为自由电子, 这个过程被称作光电离. 因此对于 2000 eV 的激光, 氖原子(离子)光吸收的主要方式为光电离, 出现透明现象意味着总的氖原子(离子)平均光电离截面降低. 为了了解透明的产生机制, 需要计算在任意时刻的平均光电离截面. 而计算平均光电离截面, 需要了解这一时刻处于不同电子组态的氖原子(离子)的数目比例. 由于可能出现的电子组态过多, 忽略数目比例较小的电子组态, 只考

虑主要的电子组态. 我们认为主要的电子组态仅来源于主要电离方式. 主要电离方式可以通过比较不同原子过程的速率大小得出.

2 主要电离方式

使用基于全相对论方法的 Flexible Atomic Code (FAC) [11] 软件, 我们计算了氖元素在 2000 eV 的 X 射线激光照射下的各壳层光电离截面 σ 和各俄歇衰变通道速率 λ_A , 部分电子组态的光电离截面和俄歇衰变速率展示在表 1 中.

表 1 2000 eV 的激光照射下氖原子(部分电子组态)的光电离截面 (10^{-20} cm^2) 和俄歇衰变速率 (10^{13} s^{-1})
Table 1. Photoionization cross sections (10^{-20} cm^2) and Auger decay rates (10^{13} s^{-1}) of Ne (partial electron configurations) under 2000 eV laser irradiation.

Ne	光电离截面 σ			俄歇衰变速率 λ_A		
	(1s)	(2s)	(2p)	(2s 2s)	(2s 2p)	(2p 2p)
1s ² 2s ² 2p ⁶	3.8755	0.1748	0.0509			
1s ² 2s ² 2p ⁴	3.9280	0.2025	0.0456			
1s ² 2s ² 2p ²	3.9182	0.2446	0.0302			
1s ² 2s2p	3.9222	0.1456	0.0188			
1s ²	3.8743					
1s2s ² 2p ⁶	2.2781	0.2145	0.0860	3.0732	9.8142	24.1338
1s2s ² 2p ⁴	2.2880	0.2530	0.0738	4.1927	9.3377	14.8568
1s2s ² 2p ²	2.2765	0.2990	0.0472	5.8229	6.6310	3.2278
1s2s2p ⁴	2.3037	0.1376	0.0798		6.5088	17.0982
1s2s2p ²	2.2895	0.1608	0.0505		4.6999	3.6317
1s2s2p	2.2690	0.1745	0.0292		2.6395	
1s2p ⁴	2.3194		0.0856			19.4633
1s2p ²	2.3041		0.0548			4.0329
1s2p	2.2816		0.0313			
1s	2.2084					
2s ² 2p ⁶		0.2565	0.1110	7.9985	27.0849	69.8562
2s ² 2p ⁴		0.3040	0.0913	10.8921	25.2268	39.1467
2s ² 2p ²		0.3546	0.0568	14.6684	17.3158	7.3741
2s2p ⁶		0.1382	0.1198		15.5283	80.2194
2s2p ⁴		0.1619	0.0981		14.9838	44.4967
2s2p ²		0.1889	0.0609		10.5832	8.7845
2s2p		0.2043	0.0340		5.5050	
2p ⁶			0.1289			91.2527
2p ⁵			0.1185			71.9918
2p ⁴			0.1051			48.9894
2p ³			0.0880			28.8376
2p ²			0.0650			8.9410
2p			0.0361			

注: (1s), (2s) 和 (2p) 分别表示光电离过程电离初态的 1s, 2s 和 2p 壳层电子; (2s 2s) 指俄歇衰变过程中一个 2s 电子填补内壳层空穴, 另一个 2s 电子作为俄歇电子被电离为自由电子; (2s 2p) 则表示一个 2s 电子填补内壳层空穴, 一个 2p 电子作为俄歇电子; (2p 2p) 表示一个 2p 电子填补内壳层空穴, 另一个 2p 电子作为俄歇电子.

光电离速率 λ_P 为光电离截面与激光光子通量密度 φ 的积: $\lambda_P = \sigma \times \varphi$, 激光光子通量密度为单位时间内通过单位面积的光子数目. 假定一个脉冲内, 激光的光子通量密度保持不变. 从中性氖原子开始, 比较它的所有光电离和俄歇衰变通道的电离速率, 其中最大者为主要电离方式的第一步. 接着比较第一步主要电离方式的产物的所有电离通道, 电离速率最大者为主要电离方式的第二步. 依次比较, 可以得到确定通量密度的激光照射下氖原子最主要的电离方式, 如图 1 所示. 对于不同的通量密度, 主要电离方式是不同的. 图 1 中所有电子组

态都属于氖原子电子组态, 红色箭头从下至上表示 2000 eV 激光的通量密度从低到高. 垂直于红色箭头的黑色横线表示确切的通量密度, 并将通量密度分隔成 15 个范围. 蓝色小箭头表示电离过程, 箭头右边的电子组态为左边的电子组态在对应的通量密度范围内最可能的产物. 电离过程从左到右, 由蓝色小箭头连接起来的 11 个电子组态为对应的通量密度范围内最主要的电离方式. 其中通量密度为 $2000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 的主要电离方式与文献 [5] 中所对应的电离方式相同.

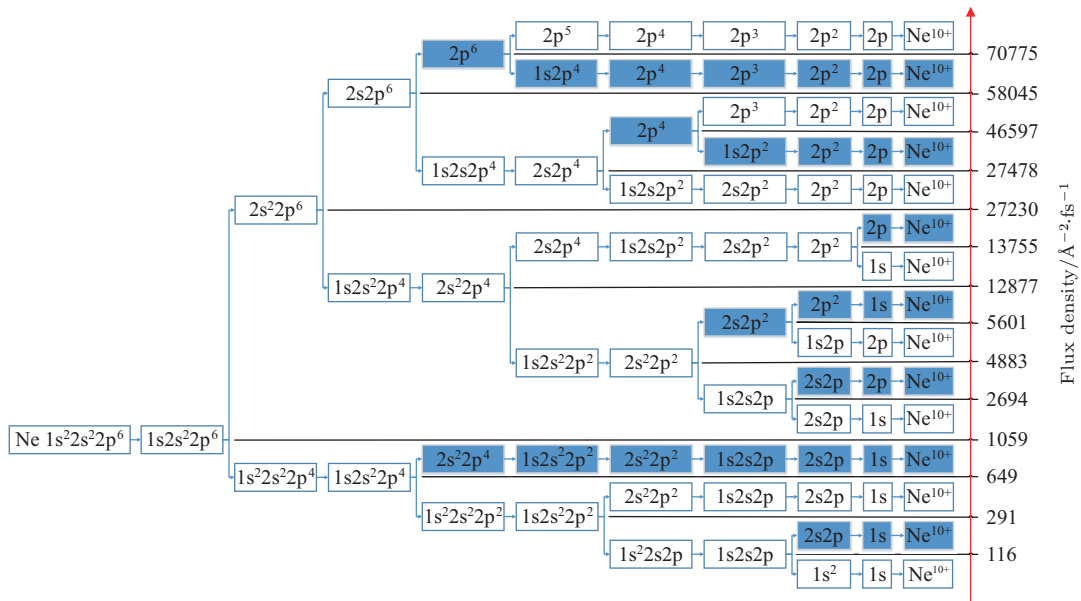


图 1 (网刊彩色) 图中所有电子组态为氖原子(离子)电子组态, 红色箭头表示 2000 eV X 射线激光光子的通量密度; 与红色箭头垂直的黑色横线表示确切的通量密度, 将通量密度分为 15 个范围; 蓝色小箭头表示电离过程, 箭头右边的电子组态为箭头左边的电子组态在对应的通量密度范围内最可能的产物; 由蓝色小箭头连接起来的 11 个电子组态为对应的通量密度范围内最主要的电离方式

Fig. 1. (color online) All electron configurations in the diagram are the various electron configurations of the neon atom, red arrow indicates the flux density of 2000 eV laser. The black horizontal lines that be perpendicular to the red arrow indicate the exact flux densities, and divide the flux density into 15 ranges. The blue arrows indicate the ionization processes. The electronic configuration on the right side of a blue arrow is the most likely product of the electronic configuration on the left in the corresponding flux density range. The 11 electron configurations, which are connected by the small blue arrows, are the main ionization modes in the corresponding flux density range.

3 各状态氖原子的数目比例

假定一个脉冲内激光通量密度不随时间变化; 在激光未照射材料之前, 只存在中性氖原子. 若将总的氖原子数目设为 1, 依靠图 1 给出的电离方式, 通过建立和解速率方程, 得到主要电离方式中中性原子和各价态离子在所有原子(离子)中数目比例随时间变化的公式,

$$N_{0t} = e^{-\lambda_1 t}, \tag{1}$$

$$N_{1t} = \lambda_1 \left(\frac{e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_2 - \lambda_1} + \frac{e^{-\lambda_2 t}}{\lambda_1 - \lambda_2} \right), \tag{2}$$

$$N_{2t} = \lambda_1 \lambda_2 \left[\frac{e^{-\lambda_1 t}}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)} + \frac{e^{-\lambda_2 t}}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_2)} + \frac{e^{-\lambda_3 t}}{(\lambda_1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)} \right], \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
 N_{3t} &= \dots \\
 &\vdots \\
 N_{8t} &= \dots \\
 N_{9t} &= \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \dots \lambda_9 \\
 &\times \left[\frac{e^{-\lambda_1 t}}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_1) \dots (\lambda_{10} - \lambda_1)} \right. \\
 &+ \frac{e^{-\lambda_2 t}}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_2)(\lambda_4 - \lambda_2) \dots (\lambda_{10} - \lambda_2)} + \dots \\
 &\left. + \frac{e^{-\lambda_{10} t}}{(\lambda_1 - \lambda_{10})(\lambda_2 - \lambda_{10}) \dots (\lambda_8 - \lambda_{10})(\lambda_9 - \lambda_{10})} \right], \tag{4}
 \end{aligned}$$

$N_{0t}, N_{1t}, N_{2t}, \dots, N_{9t}$ 分别为 t 时刻主要电离方式中中性氖原子、正 1 价氖离子、正 2 价氖离子、 \dots 正 9 价氖离子的数目比例; $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{10}$ 为主要电离方式中产生正 1 价氖离子、正 2 价氖离子、 \dots 、正 10 价氖离子的过程的电离速率. 由于在不同通量密度范围内主要电离方式不同, 因此在不同的通量密度范围内 N_{1t} 到 N_{9t} 可能表示不同电子组态的离子, λ_1 到 λ_{10} 可能表示不同的电离过程的速率. $N_{3t}, N_{4t}, \dots, N_{8t}$ 的方程与 (2)–(4) 式形式相同. 10 价氖离子 Ne^{10+} 在 t 时刻数目比例 N_{10t} 由 (5) 式给出:

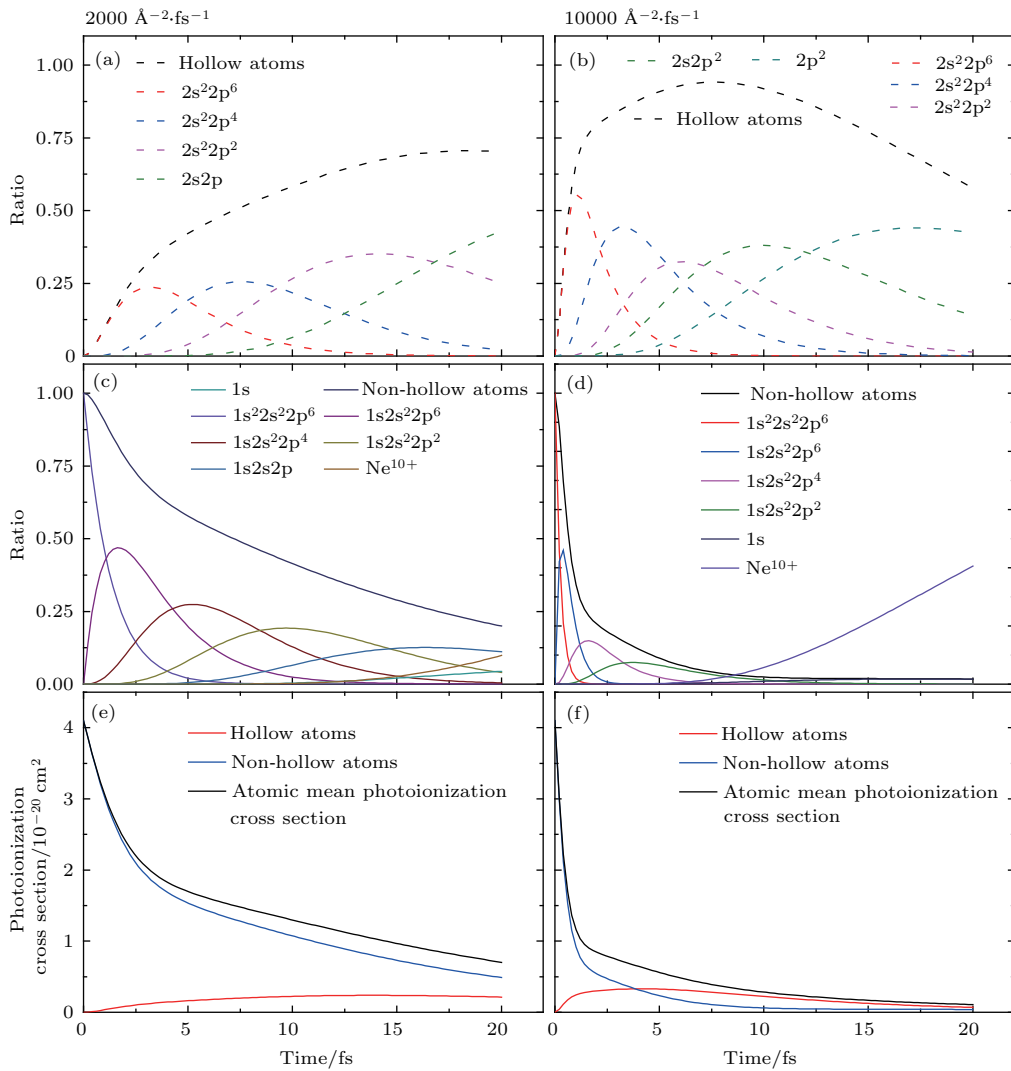


图 2 (网刊彩色) (a), (c) 和 (b), (d) 分别表示氖原子在通量密度为 2000 和 10000 $\text{\AA}^{-2}\cdot\text{fs}^{-1}$ 的 2000 eV 激光照射下各电子组态的数目的占据比例随曝光时间的变化, “Hollow atoms” 表示所有空心原子数目比例之和, “Non-hollow atoms” 表示所有非空心原子的数目比例之和; (e) 和 (f) 表示氖原子对 2000 eV 激光的原子平均光电离截面随曝光时间的变化

Fig. 2. (color online) (a)–(d) express the percentage of the number of electronic configurations varying with the exposure time of neon atoms at 2000 eV laser irradiation. The flux density for (a), (c) is $2000 \text{\AA}^{-2}\cdot\text{fs}^{-1}$, for (b), (d) is $10000 \text{\AA}^{-2}\cdot\text{fs}^{-1}$, “Hollow atom” represents the sum of the proportions of all hollow atoms, the “Non-hollow atoms” means the sum of the proportions of all non-hollow atoms. (e) and (f) express the variation curves of atomic mean photoionization cross section with exposure time of neon atom at 2000 eV laser.

$$\begin{aligned}
 N_{10t} = & 1 - \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \cdots \lambda_9 \lambda_{10} \\
 & \times \left[\frac{e^{-\lambda_1 t}}{\lambda_1 (\lambda_2 - \lambda_1) (\lambda_3 - \lambda_1) (\lambda_4 - \lambda_1) \cdots (\lambda_{10} - \lambda_1)} \right. \\
 & + \frac{e^{-\lambda_2 t}}{\lambda_2 (\lambda_1 - \lambda_2) (\lambda_3 - \lambda_2) (\lambda_4 - \lambda_2) \cdots (\lambda_{10} - \lambda_2)} + \cdots \\
 & \left. + \frac{e^{-\lambda_{10} t}}{\lambda_{10} (\lambda_1 - \lambda_{10}) (\lambda_2 - \lambda_{10}) \cdots (\lambda_8 - \lambda_{10}) (\lambda_9 - \lambda_{10})} \right]. \quad (5)
 \end{aligned}$$

文献 [5] 中, 氖原子在通量密度为 $2000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 、持续时间为 20 fs 的 2000 eV X 射线激光照射下出现 X 射线透明现象. 按照图 1 给出的电离方式, 计算光子通量密度为 2000 和 $10000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 的 2000 eV 的 X 射线激光照射下 20 fs 内氖原子主要电子组态的数目比例, 如图 2(a)—(d) 所示. 图 2(a) 和图 2(c) 表示通量密度为 $2000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 激光照射下各主要电子组态的数目比例随曝光时间的变化, 属于空心原子的电子组态在图 2(a) 中, “Hollow atoms” 表示所有空心原子数目比例之和; 非空心原子和裸核在图 2(c) 中, “Non-hollow atoms” 表示所有非空心原子数目比例之和. 图 2(b) 和图 2(d) 则表示在通量密度为 $10000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时的情况, 各项意义与图 2(a) 和图 2(c) 中相似.

4 氖原子平均光电离截面

本文认为氖原子(离子)的总的光电离截面 σ_o 为各壳层光电离截面之和: $\sigma_o = \sigma_{1s} + \sigma_{2s} + \sigma_{2p}$, σ_{1s} , σ_{2s} 和 σ_{2p} 分别为 1s, 2s 和 2p 壳层光电离截面. 在 t 时刻, 主要电离方式中中性氖原子和各价态氖离子数目比例与总的光电离截面之积的总和, 即为当前所有原子(离子)平均光电离截面,

$$\bar{\sigma} = \sum_{i=0}^{10} N_{it} \sigma_o^i, \quad (6)$$

$\bar{\sigma}$ 为在 t 时刻所有氖原子(离子)的平均光电离截面, σ_o^0 到 σ_o^{10} 分别为主要电离方式中中性氖原子到正 10 价氖离子对于 2000 eV 激光的总光电离截面. 在光子能量为 2000 eV、通量密度为 2000 和 $10000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 的 X 射线激光照射下氖原子(离子)平均光电离截面随曝光时间的变化如图 2(e) 和图 2(f), “Hollow atoms” 和 “Non-hollow atoms” 分别表示所有属于空心原子和非空心原子的电子组态对原子平均光电离截面的贡献.

如图 2, 氖原子(离子)可以分为三种: 空心原子、非空心原子以及裸核 Ne^{10+} . 曝光未开始前, 仅存在中性原子, 属于非空心原子, 这时平均光电离截面最大, 为 $4.101 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$. 随着曝光的进行, 非空心原子逐渐转换为空心原子, 平均光电离截面随之降低; 在空心原子数目达到峰值之前, 裸核的数目比例较少, 可以忽略不计. 通量密度为 $2000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时, 空心原子数目比例在 18.3838 fs 达到峰值, 即 70.54%, 此时氖原子平均光电离截面为 $0.7802 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$; 通量密度为 $10000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时, 空心原子数目比例在 7.6768 fs 达到峰值, 为 94.13%, 此时氖原子平均光电离截面为 $0.3710 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$. 空心原子数目比例在达到峰值之后, 非空心原子和空心原子最终都转换为裸核, 裸核数目不再可以忽略不计, 导致氖原子平均光电离截面继续下降.

对于 2000 eV 的激光, 裸核和空心原子都会导致氖原子(离子)的原子平均光电离截面降低, 从而表现出 X 射线透明现象. 未曝光前, 氖气中只存在中性氖原子, 属于非空心原子; 非空心原子首先被转换为空心原子, 最终非空心原子和空心原子都被转换为裸核. 在曝光前期, 裸核忽略不计, 空心原子的大量产生是原子(离子)平均光电离截面减小的主要原因; 之后, 裸核是原子平均光电离截面继续减小的主要原因.

5 价电子完整的空心原子

价电子完整的氖原子和氖离子只有 $\text{Ne} (1s^2 2s^2 2p^6)$, $\text{Ne}^+ (1s 2s^2 2p^6)$ 和空心原子 $\text{Ne}^{2+} (2s^2 2p^6)$. 如图 2, 在曝光刚开始, 以这三种氖原子(离子)为主, 绝大部分的氖原子价电子保持完整, 平均光电离截面仍可以减少一半左右, 这主要是空心原子 $\text{Ne}^{2+} (2s^2 2p^6)$ 的作用; 随后价电子不完整的离子数目很快增加, 占据主要地位. 我们这里研究 $\text{Ne}^{2+} (2s^2 2p^6)$ 在不同通量密度激光下的数目比例. 当通量密度 φ 小于 $1059 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时, 空心原子 $\text{Ne}^{2+} (2s^2 2p^6)$ 不属于主要电离方式, 这意味着此时空心原子 $\text{Ne}^{2+} (2s^2 2p^6)$ 数目比例较小, 本文暂不考虑. 激光通量密度范围在 $1059\text{--}27230 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时, $\text{Ne}^{2+} (2s^2 2p^6)$ 数目比例 $N_{2s^2 2p^6}$ 可由 (7) 式得到,

$$N_{2s^2 2p^6} = \sigma_{1s}^0 \varphi \sigma_{1s}^1 \varphi \left[\frac{e^{-\sigma_{1s}^0 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^1 \varphi - \sigma_{1s}^0 \varphi)(\lambda_{2s^2 2p^6 \rightarrow 1s 2s^2 2p^4} - \sigma_{1s}^0 \varphi)} + \frac{e^{-\sigma_{1s}^1 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^0 \varphi - \sigma_{1s}^1 \varphi)(\lambda_{2s^2 2p^6 \rightarrow 1s 2s^2 2p^4} - \sigma_{1s}^1 \varphi)} + \frac{e^{-\lambda_{2s^2 2p^6 \rightarrow 1s 2s^2 2p^4} t}}{(\sigma_{1s}^0 \varphi - \lambda_{2s^2 2p^6 \rightarrow 1s 2s^2 2p^4})(\sigma_{1s}^1 \varphi - \lambda_{2s^2 2p^6 \rightarrow 1s 2s^2 2p^4})} \right], \quad (7)$$

式中 σ_{1s}^0 , σ_{1s}^1 分别为 $\text{Ne}(1s^2 2s^2 2p^6)$ 和 $\text{Ne}^+(1s 2s^2 2p^6)$ 的 $1s$ 光电离截面, $\lambda_{2s^2 2p^6 \rightarrow 1s 2s^2 2p^4}$ 为俄歇衰变 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6) \rightarrow \text{Ne}^{3+}(1s 2s^2 2p^4)$ 的速率. 当激光通量密度大于 $27230 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时, 离子 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 的主要电离方式发生变化, 它的数目比例为

$$N_{2s^2 2p^6} = \sigma_{1s}^0 \varphi \sigma_{1s}^1 \varphi \left[\frac{e^{-\sigma_{1s}^0 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^1 \varphi - \sigma_{1s}^0 \varphi)(\sigma_{1s}^2 \varphi - \sigma_{1s}^0 \varphi)} + \frac{e^{-\sigma_{1s}^1 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^0 \varphi - \sigma_{1s}^1 \varphi)(\sigma_{1s}^2 \varphi - \sigma_{1s}^1 \varphi)} + \frac{e^{-\sigma_{1s}^2 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^0 \varphi - \sigma_{1s}^2 \varphi)(\sigma_{1s}^1 \varphi - \sigma_{1s}^2 \varphi)} \right] \\ = \sigma_{1s}^0 \sigma_{1s}^1 \left[\frac{e^{-\sigma_{1s}^0 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^1 - \sigma_{1s}^0)(\sigma_{2s}^2 - \sigma_{1s}^0)} + \frac{e^{-\sigma_{1s}^1 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^0 - \sigma_{1s}^1)(\sigma_{2s}^2 - \sigma_{1s}^1)} + \frac{e^{-\sigma_{1s}^2 \varphi t}}{(\sigma_{1s}^0 - \sigma_{2s}^2)(\sigma_{1s}^1 - \sigma_{2s}^2)} \right], \quad (8)$$

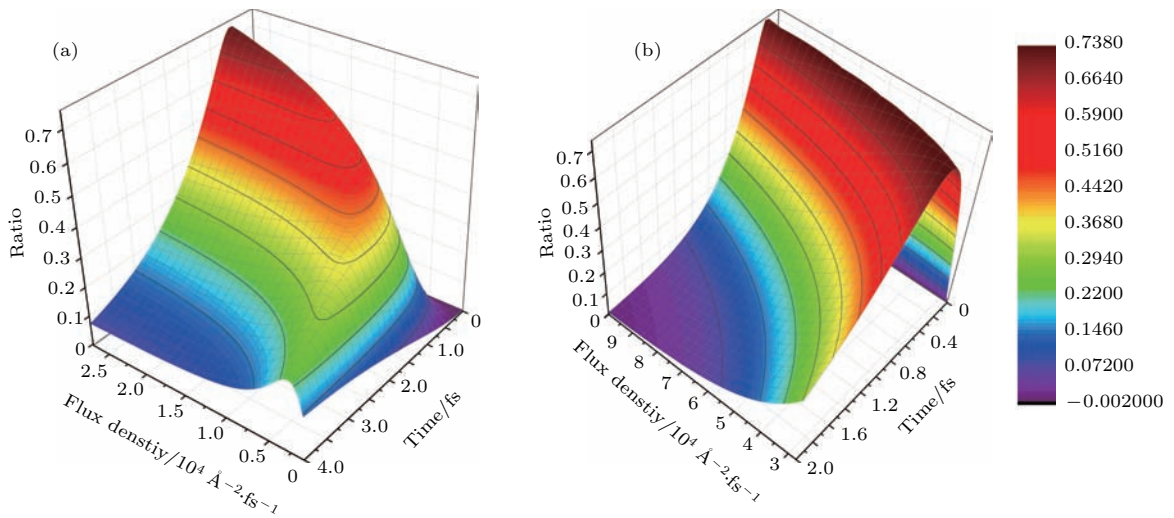


图3 (网刊彩色)空心原子 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 数目比例随激光通量密度和曝光时间的变化 (a) 通量密度范围为 $1059\text{--}27230 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$; (b) 通量密度范围为 $27230\text{--}100000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$

Fig. 3. (color online) The variation of ratio of hollow atom $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ with laser flux density and exposure time: Flux density range of (a) is from 1059 to $27230 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$, for (b) is from 27230 to $100000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$.

其中 σ_{2s}^2 为 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 的 $2s$ 壳层电子光电离截面. 图3为氖原子在 2000 eV 激光照射下空心原子 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 的数目比例随激光通量密度和曝光时间变化曲面图, 通量密度单位为 $\text{Å}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$, 时间单位为 fs . 如图3(a), 空心原子 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 数目比例有且只有一个最大值, 当激光通量密度范围在 1059 到 $27230 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时, 随着通量密度的增大, $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 最大数目比例逐渐增大至 73.70% , 并且所需的曝光时间越来越短. 如图3(b), 激光通量密度大于 $27230 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 时, 当光子通量达到 14349 \AA^{-2} , 空心原子 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 数目比例达到最大值, 固定为 73.70% ; 此时空心原子 $\text{Ne}^{2+}(2s^2 2p^6)$ 的产生与消耗都基于光电离过程, 它的最

大数目比例仅与各壳层光电离截面相关.

6 结 论

本文基于FAC程序计算的氖原子(离子)在 2000 eV 激光下的光电离截面和俄歇衰变速率, 比较氖原子(离子)不同光电离和俄歇衰变通道的速率, 得到不同通量密度下氖原子主要电离方式. 通过建立并解速率方程, 得到确定的主要电离方式中氖原子各电子组态数目比例随时间变化公式. 应用公式计算了氖原子在通量密度为 2000 和 $10000 \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{fs}^{-1}$ 的 2000 eV 激光照射下, 20 fs 内任意时刻各主要电子组态的数目比例和总的原子平均光电离截面. 发现裸核和空心原子都是氖原子

在2000 eV的激光照射下X射线透明的主要原因。裸核较少时,空心原子是透明的主要原因,当空心原子开始减少时,裸核导致截面继续减小。仅在曝光刚开始,绝大部分的氖原子(离子)价电子保持完整。建立了空心原子 Ne^{2+} ($2s^2 2p^6$)数目比例与通量密度和曝光时间关系方程,计算并得到了空心原子 Ne^{2+} ($2s^2 2p^6$)数目比例随着通量密度和曝光时间的曲面图。发现选择恰当的通量密度和脉冲持续时间可以使价电子完整的空心原子 Ne^{2+} ($2s^2 2p^6$)数目比例达到73.70%。

参考文献

- [1] Pellegrini C, Marinelli A, Reiche S 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 015006
- [2] Gahl C, Azima A, Beye M, Deppe M, Döbrich K, Haslinger U, Hennies F, Melnikov A, Nagasono M, Pietzsch A, Wolf M, Wurth W, Föhlisch A 2008 *Nat. Photon.* **2** 165
- [3] Yoneda H, Inubushi Y, Yabashi M, Katayama T, Ishikawa T, Ohashi H, Yumoto H, Yamauchi K, Mimura H, Kitamura H 2014 *Nat. Commun.* **5** 5080
- [4] Nagler B, Zastra U, Fäustlin R R, Vinko S M, Whitcher T, Nelson A J, Sobierajski R, Krzywinski J, Chalupsky J, Abreu E, Bajt S, Bornath T, Burian T, Chapman H, Cihelka J, Döppner T, Düsterer S, Dzelzainis T, Fajardo M, Förster E, Fortmann C, Galtier E, Glenzer S H, Göde S, Gregori G, Hajkova V, Heimann P, Juha L, Jurek M, Khattak F Y, Khorsand A R, Klinger D, Kozlova M, Laarmann T, Lee H J, Lee R, Meiwesbroer K H, Mercere P, Murphy W J, Przystawik A, Redmer R, Reinholz H, Riley D, Röpke G, Rosmej F, Saks K, Schott R, Thiele R, Tiggesbäumker J, Toleikis S, Tschentscher T, Uschmann I, Vollmer H J, Wark J S 2009 *Nat. Phys.* **5** 693
- [5] Young L, Kanter E P, Krässig B, Li Y, March A M, Pratt S T, Santra R, Southworth S H, Rohringer N, DiMauro L F, Doumy G, Roedig C A, Berrah N, Fang L, Hoener M, Bucksbaum P H, Cryan J P, Ghimire S, Glowia J M, Reis D A, Bozek J D, Bostedt C, Messerschmidt M 2010 *Nature* **466** 56
- [6] Chapman H N 2015 *Synchrotron. Radiat. News* **28** 20
- [7] Wei L, Wacker D, Gati C, Han G W, James D, Wang D, Nelson G, Weierstall U, Katritsch V, Barty A, Zatsepin N A, Li D, Messerschmidt M, Boutet S, Williams G J, Koglin J E, Seibert M M, Chong W, Shah S T A, Basu S, Fromme R, Kupitz C, Rendek K N, Grotjohann I, Fromme P, Kirian R A, Beyerlein K R, White T A, Chapman H N, Caffrey M, Spence J C H, Stevens R C, Cherezov V 2013 *Science* **342** 1521
- [8] Boutet S, Lomb L, Williams G J, Barends T R M, Aquila A, Doak R B, Weierstall U, de Ponte D P, Steinbrener J, Shoeman R L, Messerschmidt M, Barty A, White T A, Kassemeyer S, Kirian R A, Seibert M M, Montanez P A, Kenney C, Herbst R, Hart P, Pines J, Haller G, Gruner S M, Philipp H T, Tate M W, Hromalik M, Koerner L J, Bakel N V, Morse J, Ghonsalves W, Arnlund D, Bogan M J, Coleman C, Fromme R, Hampton C Y, Hunter M S, Johansson L C, Katona G, Kupitz C, Liang M, Martin A V, Nass K, Redecke L, Stellato F, Timneanu N, Wang D, Zatsepin N A, Schafer D, Defever J, Neutze R, Fromme P, Spence J C H, Chapman H N, Schlichting I 2012 *Science* **337** 362
- [9] Neutze R, Wouts R, van der Spoel D, Weckert E, Hajdu J 2000 *Nature* **406** 752
- [10] Son S K, Young L, Santra R 2011 *Phys. Rev. A* **83** 033402
- [11] Gu M F 2008 *Can. J. Phys.* **86** 675

2000 eV X-ray laser transparent mechanism of neon atom^{*}

Feng Lei¹⁾³⁾ Jiang Gang^{2)3)†}

1) (*College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610065, China*)

2) (*Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*)

3) (*Key Laboratory of High Energy Density Physics and Technology, Sichuan University, Chengdu 610065, China*)

(Received 5 April 2017; revised manuscript received 25 May 2017)

Abstract

X-ray transparency occurs during the interaction of X-ray free electron laser with matter. The study of the mechanism of X-ray transparency is of great value for understanding the interaction between X-ray free electron laser and matter. In this paper, the main ionization modes from neutral neon atom till bare nucleus at different flux densities are determined based on the 2000 eV photoionization cross sections and the Auger decay rates of various neon atoms (ions), calculated by the Flexible Atomic Code program. By establishing and solving the rate equations, the formulas of the proportions of various electronic configurations of neon in the main ionization mode are obtained. The proportions of electron configurations in the main ionization modes and the atomic average photoionization cross sections at flux densities of 2000 and 10000 $\text{\AA}^{-2}\cdot\text{fs}^{-1}$ are calculated by using the formulas. The ratios of the number of hollow atoms to that of complete valence electrons at any time under different flux density laser irradiations are calculated. It is found that both the bare nuclei and the hollow atoms cause X-ray transparency, and a relatively high ratio of the number of hollow atoms to that of complete valence electrons can be achieved by choosing appropriate flux density and pulse duration.

Keywords: X-ray transparency, X-ray free electron laser, hollow atom, neon

PACS: 32.80.Hd, 32.80.Aa, 32.80.Hd

DOI: [10.7498/aps.66.153201](https://doi.org/10.7498/aps.66.153201)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11474208).

† Corresponding author. E-mail: gjiang@scu.edu.cn