

文章编号: 1007-4627(2002)02-0161-04

# 非平衡等离子体中原子过程的计算\*

吴泽清

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

**摘 要:** 为得到由中、高  $Z$  元素形成的非局域热动平衡等离子体中的离子丰度分布的可靠信息, 对建立速率方程所需的各种离子的各个原子过程采用了基于一级微扰论的计算, 提高了原子参数的精度; 为了进一步节省计算时间, 在保证精度的前提下, 针对不同的过程做了不同的近似处理; 对各个原子过程的计算结果进行多方比较, 表明精度可靠.

**关键词:** 原子参数; 非局域热动平衡; 速率方程

**中图分类号:** O562      **文献标识码:** A

## 1 引言

在惯性约束聚变(ICF)、X光激光和天体研究中, 常常要面对处于非局域热动平衡状态(NLTE)的等离子体, 需要知道非平衡等离子体的辐射和吸收性质<sup>[1]</sup>. 正是 ICF 和 X 光激光等的需要推动了对非平衡等离子体研究的发展, 使得对非平衡等离子体的计算研究成为目前国际上一个研究热点<sup>[2]</sup>.

要计算非平衡等离子体的辐射和吸收性质, 首先要知道等离子体中各种离子的分布. 对非平衡等离子体而言, 必须通过求解速率方程才能得到离子分布, 这使得对非平衡等离子体的计算区别于并大大复杂于对平衡等离子体的计算, 因为速率方程中涉及到多种原子过程的计算, 每一个原子过程的计算都是一个单独的研究课题, 更何况要对等离子体中大量的离子类型进行计算. 要建立速率方程, 首先要解决原子过程的计算.

非平衡计算在 20 世纪 90 年代后期开始成为国际热点问题, 各种模型都有了很大发展<sup>[3-6]</sup>, 原子结构和原子过程都考虑得更加细致. 近几年, 发展细致组态模型成为一种趋势. 国外由于原子参数的准备工作做得较早, 从 20 世纪 80 年代初就开始研究计算大量组态、能级以及各种截面的方法, 因此细致组态模型的发展很快, 从早期的只能计算轻元素、包含较少的组态到可以对中  $Z$  和高  $Z$  元素进行计算, 原子参数也从简单公式计算或非在线计算发

展到用各种参数势或自洽势进行在线计算. 基于能级的 DLA 模型建立和发展, 也只能对低  $Z$  元素进行计算. 各种模型计算的结果符合得很不好<sup>[2]</sup>, 原因主要有两个: 一是各种模型中, 采用的原子参数的精度不同; 二是各个模型包含的组态数目相差较大, 没有将所有重要的组态类型都包含进去.

我们试图发展一套完整的非平衡细致组态模型程序, 能够进行精度较高的计算. 首先提高原子参数的精度, 并发展一套计算原子过程的方法, 既能保证一定精度又能快速计算, 以满足非平衡计算的要求.

## 2 理论方法

由于中、高  $Z$  元素等离子体中, 组态的数目十分巨大, 能级的数目更多, 必须在精度、计算速度和内存三方面做协调. 速率方程中所需的能级和各种截面都有很多的计算方案, 其精度和计算量都相差悬殊. 我们选用基于一级微扰论的方法来计算各种截面. 这种方法在中、高能区能得到较好的结果, 但在阈值附近计算结果较差, 但这对速率系数的影响并不大. 即使是用一级微扰方法, 由于离子数目巨大, 其计算量也是相当可观的. 为了进一步减少计算量, 我们还要采用组态平均的方式来计算. 此外, 针对具体的过程还要做一些具体的近似, 在下

收稿日期: 2002-03-11; 修改日期: 2002-04-04

\* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10175011)

作者简介: 吴泽清(1969-), 女(汉族), 重庆忠县人, 副研究员, 从事非平衡等离子体不透明度计算研究.

面讨论. 以下的公式都是在上面的前提下得到的.

### 2.1 原子结构的计算

我们用 HFS 自洽势计算束缚电子结合能和波函数<sup>[7]</sup>, 在此计算中, 还可以将等离子体环境对原子结构的影响考虑进去. 计算碰撞过程和光电离时, 自由电子波函数采用库仑波或扭曲波近似.

### 2.2 组态平均的电子碰撞激发截面

设电子由  $n_0 l_0$  轨道激发到  $n_1 l_1$  轨道, 组态由  $C-C'$ ,  $i, j$  为能级,  $i \in C, j \in C'$ , 激发截面为<sup>[8]</sup>

$$\sigma(i \rightarrow j) = \sum_{\kappa} Q_{\kappa}(i, j) \sigma_{\kappa}(l_0, l_1) + \sum_{\kappa} Q_{\kappa}^*(i, j) \sigma_{\kappa}^*(l_0, l_1), \quad (1)$$

$$\sigma_{\kappa}(l_0, l_1) = \frac{4}{[l_0 \kappa]^2 k_0^2} \sum_{\lambda_0 \lambda_1} R_{\kappa}^d (R_{\kappa}^d - R_{\kappa}^e), \quad (2)$$

$$\sigma_{\kappa}^*(l_0, l_1) = \frac{4}{[l_0 \kappa]^2 k_0^2} \sum_{\lambda_0 \lambda_1} (R_{\kappa}^e)^2, \quad (3)$$

$$R_{\kappa} = \sum_{\kappa'} (-1)^{l_0+l_1+\kappa'} (2\kappa+1) \cdot \begin{Bmatrix} \kappa & l_0 & l_1 \\ \kappa' & \lambda_0 & \lambda_1 \end{Bmatrix} R_{\kappa'}^e, \quad (4)$$

其中,  $R_{\kappa}^d$  和  $R_{\kappa}^e$  分别是径向积分的直接积分和交换积分.  $Q_{\kappa}, Q_{\kappa}^*$  是角度因子, 与  $l_0, l_1, s_0, s_1$  以及总自旋角动量  $S$ 、总轨道角动量  $L$  和总角动量  $J$  有关, 其表达式比较复杂, 包含众多的  $3n-j$  符号的计算和角动量耦合方式, 计算量很大.

做组态平均近似, 组态到组态的截面可表达为

$$\sigma(C-C') = \frac{N_{l_0} (g_{l_1} - N_{l_1})}{g_{l_0}} \left\{ \sum_{\kappa} \sigma_{\kappa}(l_0, l_1) + \sum_{\kappa} \sigma_{\kappa}^*(l_0, l_1) \right\}, \quad (5)$$

其中,  $g_{l_0}, g_{l_1}$  是简并度,  $N$  是轨道电子数, 角度因子的计算没有了.

在实际计算中, 对  $\lambda_0 \lambda_1$  的求和只能是有限的, 而(2), (3)式中对  $\lambda_0 \lambda_1$  的求和收敛又很慢, 一个可行的方法是对大分波采用 Born 近似:

$$\sigma_{\kappa} = \sum_{\lambda_0 \lambda_1} [\sigma_{\kappa}(\lambda_0 \lambda_1) - \sigma_{\kappa}^B(\lambda_0 \lambda_1)] + \sigma_{\kappa}^B, \quad (6)$$

其中,  $\sigma_{\kappa}^B(\lambda_0 \lambda_1)$  是 Born 近似的分波表示, 公式与前面一样, 只是自由电子的波函数不用扭曲波或

库仑波计算, 而用平面波的分波形式, 且不计算交换截面.  $\sigma^B$  是 Born 近似截面.

### 2.3 组态平均的碰撞电离截面

电子碰撞电离截面与碰撞激发截面的计算是相似的, 不同的是要对末态自由电子的角动量求和并对能量积分. 设入射电子的能量为  $\epsilon_0$ , 电离电子的能量为  $\epsilon'$ ,  $I$  为组态平均的电离能. 采用组态平均近似后, 截面可表达为

$$\sigma = N_{l_0} \sum_{l'} \int_0^{(\epsilon-I)^{1/2}} \sum_{\kappa} \sigma_{\kappa}(n_0 l_0, \epsilon' l') d\epsilon', \quad (7)$$

$$\sigma_{\kappa}(n_0 l_0, \epsilon' l') = \sigma_{\kappa}^*(n_0 l_0, \epsilon' l') + \sigma_{\kappa}^{\bullet}(n_0 l_0, \epsilon' l'). \quad (8)$$

碰撞电离截面的表达式形式虽然简单, 但却是计算量最大的一个过程, 因为它涉及到三个连续态电子的计算, 包含对末态电子的能量积分和对三个连续态电子所有可能的角动量组合求和, 这个求和也是收敛缓慢的. 在实际计算中, 为了减少计算量, 可以根据不同情况对自由电子的角动量做不同的选择, 只选择贡献大的角动量组合, 其余分波用平面波 Born 近似计算, 这样虽然会损失一点精度, 但计算量却大大减少.

### 2.3 组态平均的光电离截面和光复合截面

组态平均的光电离截面可以写成如下形式:

$$\sigma_{\nu}(C-C') = \frac{N_{l_0}}{2l_0+1} \frac{4\epsilon_{\omega}\alpha}{3} \sum_{\lambda=l_0\pm 1} R^2(l_0\lambda), \quad (9)$$

$$R(l_0\lambda) = [\max(l_0, \lambda)]^{1/2} \int_0^{\infty} P_{n_0 l_0}(r) r \cdot P_{\epsilon\lambda}(r) dr, \quad (10)$$

此处,  $\alpha$  为精细结构常数,  $\epsilon_{\omega}$  为光子能量,  $\epsilon$  为连续态电子的能量, 能量的单位为 Ry.

利用细致平衡原理, 可以得到逆过程辐射复合截面为

$$\sigma_{\nu} = \left(1 - \frac{N_{l_0}}{2(2l_0+1)}\right) \frac{\epsilon_{\omega}^3 \alpha^3}{3\epsilon} \cdot \sum_{\lambda=l_0\pm 1} R^2(l_0\lambda), \quad (11)$$

## 3 计算结果

ATOM 程序是一套在屏蔽参数势下, 以一级

微扰论为基础计算各种原子过程的程序. 我们在此程序的基础上做一些改造以适应我们的需要. 首先, 屏蔽势不适用于对各种类型的离子组态进行计算, 如对内壳层有空穴的组态、多电子激发态等计算束缚能误差很大. 为了对各种类型的离子组态进行计算, 我们首先将原子结构部分改造为 HFS 自洽场加相对论修正的计算. 改造后, 得到的束缚能、波函数和偶极径向积分都与 COWAN 程序计算结果符合较好, 能级相差小于 1%, 偶极径向积分相差小于 50%.

### 3.1 碰撞电离的计算结果

我们计算了大量离子的碰撞电离截面, 并与其他人的计算结果进行了比较. 图 1 是 O III 到 O IV 的电离截面. 实线是我们的结果, 虚线是他人的结果<sup>[9]</sup>, 两者相差最大的点不超过 20%, 大部分点相差在 10% 以内. 图 2 是类-Ne, Ge 基态 2p 电子的电离截面, 实线是我们的结果, 虚线是

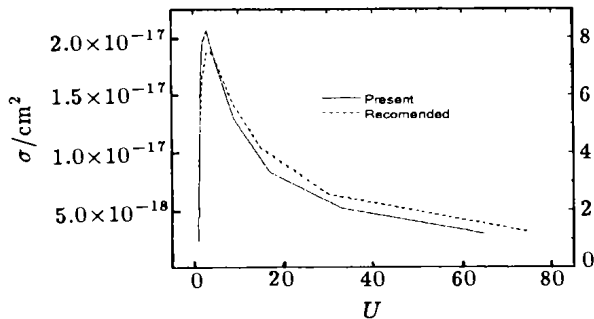


图 1 O III 基态离子电离到 O IV 的总碰撞电离截面, 包含 1s, 2s 和 2p 电子的电离  
 $U = (E/I) - 1$ ,  $E$  为入射电子能量,  $I$  为电离能.

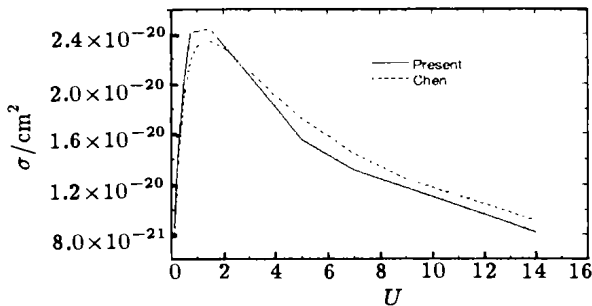


图 2 类 Ne, Ge 基态离子 2p 壳的电子碰撞电离截面  
 $U = (E/I) - 1$ ,  $E$  为入射电子能量,  $I$  为电离能.

王炎森的结果<sup>[10]</sup>, 两条线符合得非常好, 误差在 10% 左右. 王炎森的程序用的是扭曲波, 对总角

动量求和到 50, 而我们用的是库仑波, 对自由电子角动量求和不到 20, 计算时间比他们少一大半, 而计算误差大都在 20% 以内, 可以接受. 除了以上几个例子, 我们还进行了大量计算和比较, 碰撞电离结果的误差在 30% 以内.

### 3.2 碰撞激发的计算结果

对碰撞激发, 我们也计算了大量结果, 并与其他人的结果进行了比较. 表 1 列出了类 Ne, Se 2p-3p 的碰撞强度与法国 Marguerite Cornille 等<sup>[11]</sup>理论结果(扭曲波, 含组态相互作用)的比较, 二者符合得非常好. 图 3 是类 Ge, Au 和类 Fe, Au 的 3d-5f 的激发速率系数, 及与方泉玉等人利用扭曲波、组态平均近似计算结果的比较, 两者相差最大在 20% 左右.

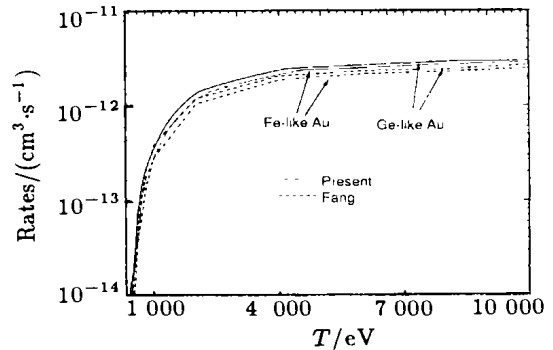


图 3 类 Fe Au 和类 Ge Au 基态离子 3d-5f 碰撞激发速率系数的比较  
 $T$  为电子温度.

表 1 类 Ne, Se 2p-3p 的碰撞强度与 Margurite<sup>[11]</sup> 理论结果的比较

$E/Ry$	本工作的计算结果	Margurite 的理论结果
155	$3.69 \times 10^{-2}$	$3.70 \times 10^{-2}$
200	$3.63 \times 10^{-2}$	$3.61 \times 10^{-2}$
400	$3.56 \times 10^{-1}$	$3.53 \times 10^{-1}$
800	$3.68 \times 10^{-1}$	$3.56 \times 10^{-1}$

### 3.3 光电离截面

图 4 是 N II 离子 5s 激发态的光电离截面与 Vladimir<sup>[12]</sup>等人用模型势计算结果的比较. 图中, 两条曲线符合稍差, 相差 20% 左右. 由于我们用的是从头算起的 HFS 势, 应该比用模型势计算的结果更可信.

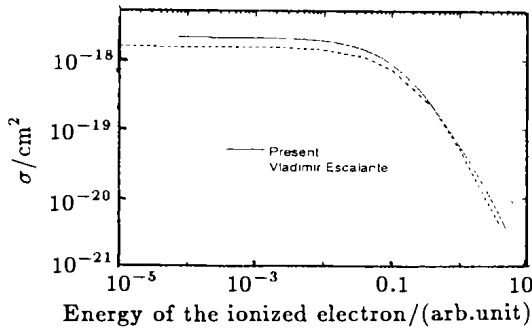


图 4 N II 离子激发态(2s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>1</sup>5s)5s 壳光电离截面的比较

#### 4 总结

前面我们发展了一套计算非平衡等离子体中原子过程的理论和程序框架,包括计算光激发、光电离、碰撞激发、碰撞电离和它们的逆过程.对原子过程计算的结果,使我们确信利用这一套方法计算原子过程能够得到精度可靠的结果;可以将这一套方法用于非平衡计算.目前,这个工作正在进行中.

#### 参 考 文 献:

- [1] Mead L W C, Stover E K, Kauffman R L, *et al.* Modeling, Measurements, and Analysis of X-ray Emission from 0.26- $\mu\text{m}$ -laser-irradiated Gold Disks[J]. *Phys Rev*, 1988, **A38**: 5 275.
- [2] Lee R W, Nash J K, Ralchenko Y. Review of the NLTE Kinetics Code Workshop[J]. *JQSRT*, 1997, **58**: 737.
- [3] Bar-Shalom A, Oreg J, Klapish M. Non-LTE Superconfiguration Collisional Radiative Model[J]. *JQSRT*, 1997, **58**: 427.
- [4] Albritton J R, Wilson B G. NLTE Ionization and Energy Balance in High-Z Laser-plasma Including Two-electron Transitions[J]. *JQSRT*, 2000, **65**: 1.
- [5] Wu Zeqing, Li Shichang, Han Guoxing. Opacity Calculations for a Non-LTE System with Three-temperature Model [J]. *JQSRT*, 1996, **56**: 623.
- [6] Wu Zeqing, Zhang Benai, Qiu Yubo. The Non-local Thermodynamical Equilibrium Effects on Opacity [J]. *Communication in Theoretical Physics*, 2001, **35**: 330.
- [7] Cowan R D. *The Theory of Atomic Structure and Spectra* [M]. University of California Press, 1981.
- [8] Shevelko V P, Vainstein L A. *Atomic Physics for Hot Plasmas*[M]. Institute of Physics Publishing, 1993.
- [9] Bell K L, Gilbody H B, Hughes J G, *et al.* *Atomic and Molecular Data for Fusion Part I: Recommended cross sections and rates for electron ionization of light atoms and ions* [M]. Culham Laboratory, Abingdon, Oxon, UK, 64.
- [10] Chen C Y, Teng Z X, Yan S X, *et al.* Electron-ion Collisional Ionization Cross Sections and Rates for the Ne Isoelectronic Sequence[J]. *Atomic Data and Molecular Data Tables*, 1998, **70**: 255.
- [11] Corneille M, Dubau J, Jacquemot S. Radiative and Collisional Atomic Data for Neon-like Ions[J]. *Atomic Data and Molecular Data Tables*, 1994, **58**: 1.
- [12] Escalante V, Victor G A. Photoionization of Excited States of Neutral Atomic Carbon and Singly Ionied Nitrogen [J]. *Atomic Data and Molecular Data Tables*, 1992, **51**: 1.

## Calculations of Atomic Processes in Nlte Plasmas\*

WU Ze-qing

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

**Abstract** : The atomic processes which involves in the non-local-thermodynamic-equilibrium(NLTE) rate equations are calculated based on the first order perturbation theory. Various approximations are applied for different processes in order to reduce computer time. Comparisons are made between the present results and those of other calculations for various processes. The accuracy of the present methods is within 30%.

**Key words** : atomic parameter; non-local-thermodynamic-equilibrium; rate equation

\* **Foundation item** : National Natujral Science Foundation of China (10175011)