

文章编号: 1007-4627(2002)02-0261-04

DTA 模型计算高温 Mg 等离子体的辐射不透明度*

靳奉涛, 曾交龙, 袁建民

(国防科技大学理学院应用物理系, 湖南 长沙 410073)

摘要: 使用 DTA(detailed term accounting)模型计算了温度为 56 eV、密度为 0.01 g/cm³ 的 Mg 等离子体的辐射不透明度以及 Rosseland 和 Planck 平均不透明度. 对于处于局域热动平衡(LTE)下的 Mg 等离子体, 利用 Saha 方程计算出各价离子的丰度. MCHF 方法得到 Mg 各价离子的能级以及束缚-束缚跃迁的振子强度, 考虑了 Doppler 展宽和碰撞展宽, 谱线线型采用 Voigt 线型. 束缚-自由以及自由-自由吸收截面使用 AA 模型得到.

关键词: Mg 等离子体; 辐射不透明度; DTA 模型

中图分类号: O56 **文献标识码:** A

1 引言

等离子体辐射不透明度最初是由于天体物理的需要而得以研究的. 近来, 由于核武器设计以及等离子体诊断等实际应用的需要, 人们在不透明度的研究中做了大量的工作, 发展了各种理论模型, 如 AA(averaged atom)模型、UTA(unresolved transition array)模型以及 DTA(detailed term accounting)模型等. 受到计算条件的限制, 早期不透明度的计算中人们往往使用 AA 模型, 这种模型计算量小, 在计算重元素时具有优势, 但计算结果粗糙. DTA 模型是细致到谱项层次的理论模型, 它的计算量大, 结果较为精确, 但应用于重元素时, 由于计算量太大, 往往使计算无法进行. UTA 模型介于两者之间. 最近, 曾交龙等^[1]使用 DTA 模型研究了 Al 激光等离子体的辐射不透明度以及内壳层跃迁的透射谱, 结果与实验符合较好, 并与其它的理论模型作了对比. 本文使用 DTA 模型研究处于温度为 56 eV、密度为 0.01 g/cm³ 的 Mg 等离子体的不透明度, 在此温度下, Mg 的各价离子都存在, 粒子数最多的几种离子对不透明度起着主要的作用. 本文采用 Breit-Puli 相对论修正的 MCHF^[2](multi-configuration Hartree-Fock)方法, 考虑了组态相互作用(CI), 计算了 Mg 等离子体中各价元素的束缚能级和束缚-束缚跃迁的振子强度. 光电离

与连续吸收部分使用 AA 模型计算得出.

2 理论方法

2.1 粒子数分布, Saha 方程^[3]

在 LTE 近似下的等离子体, 设温度 T 与粒子数密度 N 已知, 粒子数分布就可由 Saha 方程解出:

$$\frac{N_{i+1}N_e}{N_i} = \frac{Z_e Z_{i+1}}{Z_i} \exp\left[-\frac{(\phi_i - \Delta\phi_i)}{kT}\right], \quad (1)$$

$$N = \sum_u N_u, \quad (2)$$

$$N_e = \sum_u q N_u, \quad (3)$$

其中 N_e 为总自由电子数的密度, N_i 为 i 价离子的数密度, N_u 是 i 价离子的 t 谱项的粒子数密度, ϕ_i 是电离能, $\Delta\phi_i$ 是电离能下降, k 是玻耳兹曼常数, Z_i 和 Z_e 分别是 i 价离子和自由电子的配分函数^[3]. N_i 得出后, 根据玻耳兹曼激发公式, i 价离子中各激发态的粒子数为

$$N_u = \frac{g_u N_i}{Z_i} e^{(-E_u/kT)}, \quad (4)$$

其中 E_u 为 i 价离子第 t 个谱项相对于基态的能量.

等离子体环境造成的电离能下降(IPD)对于粒

收稿日期: 2002-03-08; 修改日期: 2002-03-27

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19974075); 国家杰出青年科学基金(10025416)

作者简介: 靳奉涛(1976-), 男(汉族), 山东章丘人, 博士研究生, 从事原子分子物理研究.

子数分布能够产生一定的影响, 电离能下降的存在使得原本是束缚态的能级处于电离阈以上, 束缚态数目减少, 配分函数变小, 从而影响 Saha 方程的求解. 计算 IPD 的理论模型有离子气模型、Debye-Huckel 模型以及 Stewart-Pyatt 模型等^[4], 本文采用 Debye-Huckel 模型, 即

$$\Delta\phi_i = \frac{z_i e^2}{4\pi\epsilon_0} \sqrt{\frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 kT}}, \quad (5)$$

其中 z_i 是离子的净电荷数 ($z_0=1$ 表示原子), ϵ_0 是真空介电常数.

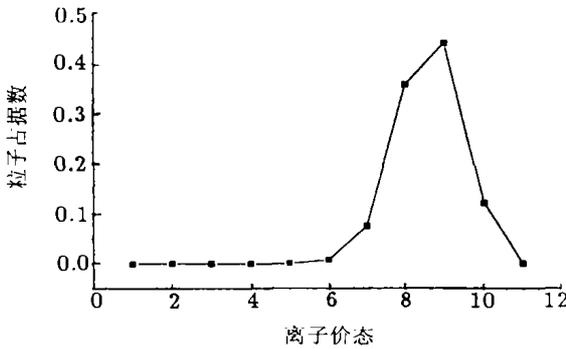


图 1 局域热动平衡下、温度为 56 eV、密度为 0.01 g/cm³ 的 Mg 等离子体各价离子的粒子占据数的分布

图 1 给出了温度为 56 eV、密度为 0.01 g/cm³ 的 Mg 等离子体各价离子的粒子占据数的分布. 可以看出, 在此条件下 Mg⁹⁺ 所占比重最大, 为 44.01%, Mg⁸⁺ 次之, 为 35.74%, Mg⁷⁺ 占 7.46%, Mg¹⁰⁺ 占 12.02%, 其它离子所占比重不足 0.008%, 所以等离子体对光子的吸收主要来自于 Mg⁹⁺ 和 Mg⁸⁺.

2.2 不透明度

等离子体对能量为 $h\nu$ 的光子的吸收系数为

$$\mu(h\nu) = \mu_{bb}(h\nu) + \mu_{bf}(h\nu) + \mu_{ff}(h\nu), \quad (6)$$

即总的吸收系数由线吸收、光电离、连续吸收系数组成. 束缚-束缚吸收系数可以由下式得到:

$$\mu_{bb}(h\nu) = \sum_i \left[\sum_{i'} N_i \sigma_{ii'}(h\nu) \right], \quad (7)$$

$\sigma_{ii'}(h\nu)$ 表示 i 价离子吸收一个能量为 $h\nu$ 的光子后从 i 态跃迁到 i' 态所对应的吸收截面. 它的定义是

$$\sigma_{ii'}(h\nu) = \frac{\pi h e^2}{m_e c} f_{ii'} S(h\nu), \quad (8)$$

其中 S 是线型函数, $f_{ii'}$ 是 i 价离子从 i 态跃迁到 i' 态的振子强度. 考虑到等离子体中谱线的碰撞展宽和多普勒展宽, S 取 Voigt 线型

$$S(h\nu) = \frac{\sqrt{1\ln 2}}{\sqrt{\pi}\Gamma_d} H(\alpha, \nu), \quad (9)$$

其中

$$H(\alpha, \nu) = \frac{\alpha}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2}}{a^2 + (\nu - x)^2} dx,$$

$$a = \frac{\sqrt{1\ln 2}\Gamma_l}{\Gamma_d},$$

$$\nu = \sqrt{1\ln 2} \frac{(h\nu - h\nu_0)}{\Gamma_d},$$

Γ_d 和 Γ_l 分别是多普勒半宽和洛伦兹半宽^[5, 6]. (1) 式的后两项, 即光电离和连续吸收部分使用 AA 模型计算得到^[5]. 考虑了离子受激发射后, 不透明度定义为

$$\kappa(u) = \frac{\mu'(u)}{\rho}, \quad (10)$$

其中 $u = h\nu/kT$, $\mu'(u) = \mu(u)[1 - \exp(-u)]$, 在实际应用中, 常常采用 Rosseland 平均不透明度和 Planck 平均不透明度, 它们的定义是

$$\frac{1}{\kappa_R} = \int_0^\infty \frac{\rho W_R(u) du}{\mu'(u)},$$

$$\frac{1}{\kappa_P} = \int_0^\infty \frac{\mu'(u) W_P(u) du}{\rho}, \quad (11)$$

W_R 和 W_P 是积分权重函数

$$W_R(u) = \frac{15}{4\pi^4} \frac{u^4 \exp(-u)}{[1 - \exp(-u)]^2},$$

$$W_P(u) = \frac{15}{\pi^4} \frac{u^3 \exp(-u)}{1 - \exp(-u)}. \quad (12)$$

2.3 MCHF 方法

求解 Saha 方程以及计算吸收系数所需要的能级和跃迁数据使用考虑了 Breit-Pauli 相对论修正的 MCHF (multi-configuration Hartree-Fock) 方法计算得到. 径向波函数计算的好坏直接影响到能级和振子强度的结果. 如果要针对某一个能级进行计算, 可以引入许多其它的组态和赝轨道使得能级的径向波函数得到优化, 所得结果与实验数据可以符合得很好, 这种方法一般用于精确计算单独的能级

以及谱线, 以与实验观察到的谱线相比较. 由于计算不透明度需要的能级数据往往成千上万, 而且跃迁谱线数以亿计, 一条一条地计算使得工作量巨大, 无法应用到不透明度的计算. 为了能够得到与实验符合较好的、适合于不透明度计算的数据, 径向波函数的每一个单电子轨道分别针对不同的组态优化, 使用这种方法可以大量的计算能级与谱线, 虽然在与实验的符合程度上不如前一种方法, 但对于不透明度的计算是可以接受的, 这种方法在文献 [7] 中有较详细的论述.

3 结果与讨论

等离子体中 Mg^{9+} 和 Mg^{8+} 占主要地位, 不透明度的主要贡献来自于这两种离子. 图 2(a) 是束缚-束缚跃迁对不透明度的贡献. 表 1 列出的是较为明显的几条谱线的跃迁能量及振子强度. 从表中可以看出, 在 $T=56$ eV, $\rho=0.01\text{g/cm}^3$ 条件下, 等离子体对光子的吸收主要来自于 L 壳层电子的激发. 这些跃迁的初态能量较低, 具有较大的粒子占据数且跃迁振子强度大, 因此对于不透明度有较大的贡献. 图 2(b) 是 DTA 模型与 AA 模型比较. 其中, 实线是 DTA 模型所计算的束缚-束缚部分加上 AA 模型的束缚-自由以及自由-自由部分所得到的结果, 虚线是 AA 模型的结果, 点虚线是 AA 模型计算的束缚-自由以及自由-自由不透明度. 通过图 2(a) 与 (b) 的比较可以看出, 在光子能量较低的 0—100 eV 的范围内, 线吸收和光电离以及连续吸收都有很大的贡献, 在 100—290 eV 范围内线吸收占主要地位, 而光子能量大于 290 eV 时, 光电离和连续吸收对不透明度起着主要作用. AA 模型没有 DTA 模型所显示的非常精细的结构, 而是一条平滑的曲线, 但两种模型不透明度峰值出现的能量位置相同, AA 模型体现了 DTA 模型的平均效应. DTA 模型所得 Rosseland 平均不透明度 $\kappa_R=1\,300.38\text{cm}^2/\text{g}$, Planck 平均不透明度 $\kappa_p=9\,417.28\text{cm}^2/\text{g}$; AA 模型的结果分别是 $\kappa_R=3\,357.05\text{cm}^2/\text{g}$, $\kappa_p=8\,894.15\text{cm}^2/\text{g}$. 不难看出, 两种模型的 Rosseland 平均不透明度结果相差很大, AA 模型比 DTA 模型大两倍多, 而 Planck 平均不透明度则相差不大. 可见不同的模型在 Rosseland 平均不透明度计算上有着较大的差异.

表 1 束缚-束缚跃迁谱线

跃迁	$\Delta E/\text{eV}$	振子强度
$1s^2 2p^2 \ ^3P_2 - 1s^2 2p 3s \ ^3P_2^o$	167.362	0.317 1
$1s^2 2s^2 \ ^1S_0 - 1s^2 2s 3p \ ^1P_1^o$	197.649	0.524 7
$1s^2 2s 2p \ ^3P_2^o - 1s^2 2s 3s \ ^3S_2$	172.339	0.168 7
$1s^2 2s \ ^2S_{1/2} - 1s^2 3p \ ^2P_{3/2}^o$	214.064	0.427 2
$1s^2 2p \ ^2P_{3/2}^o - 1s^2 3s \ ^2S_{1/2}$	188.061	0.090
$1s^2 2p^2 \ D_{3/2}^o - 1s^2 3d \ ^2P_{3/2}$	195.650	2.407

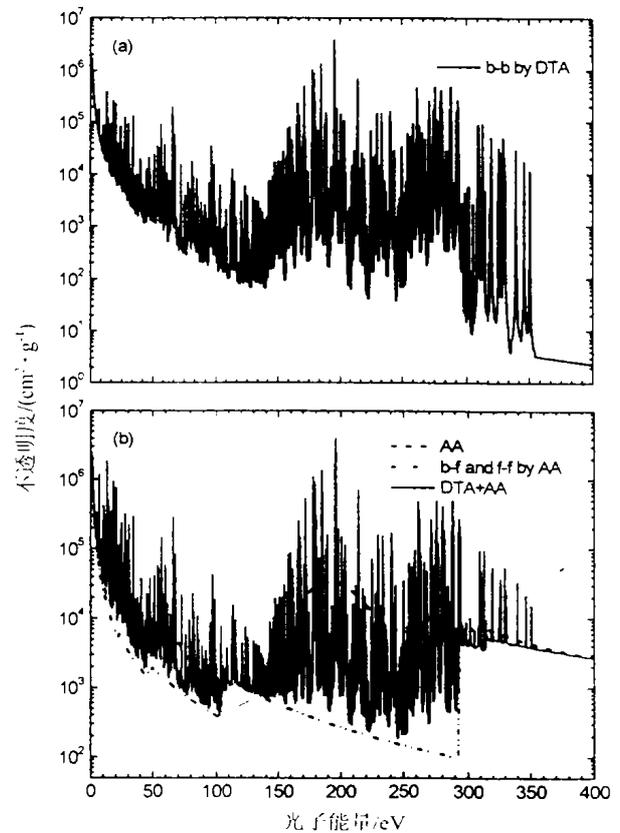


图 2 温度 $T=20$ eV, 密度 $\rho=0.01\text{g/cm}^3$ 条件下 Mg 等离子体的辐射不透明度

(a) 束缚-束缚跃迁不透明度; (b) --- 为 AA 模型计算的不透明度, $\kappa_R=3\,357.05\text{cm}^2/\text{g}$, $\kappa_p=8\,894.15\text{cm}^2/\text{g}$; ... 为 AA 模型计算的 b-f 与 f-f 部分, — 是 DTA 的结果, $\kappa_R=1\,300.38\text{cm}^2/\text{g}$, $\kappa_p=9\,417.28\text{cm}^2/\text{g}$.

总之, 本文使用细致谱项模型研究了高温 Mg 等离子体的辐射不透明度, MCHF 方法计算原子数据, 解 Saha 方程求得等离子体粒子数分布. DTA 模型的结果与 AA 模型的结果进行了对比, 两种模型之间 Rosseland 平均不透明度有较大差异, 而 Planck 平均不透明度相符较好.

参 考 文 献:

- [1] 曾交龙. 使用细致谱项模型研究铝等离子体的辐射不透明度 [D]. 长沙: 国防科学技术大学理学院应用物理系, 2001.
- [2] Fischer C F. The MCHF Atomic-structure Package [J]. Comput Phys Commun, 1991, **64**: 369.
- [3] 李世昌. 高温辐射物理与量子辐射理论[M]. 北京: 国防工业出版社, 1992.
- [4] Heading D J, Wark J S, Bennett G R, *et al.* Simulations of Spectra from Dense Aluminium Plasmas [J]. J Quant Spectrosc Radiat Transfer, 1995, **167**: 54.
- [5] Zeng Jiaolong, Jin Fengtao, Yuan Jianmin. Detailed Spectral Line Effects on the Radiative Opacity of Laser-produced Al plasma [J]. Chin Phys Lett, 2001, **18**: 924.
- [6] Zeng Jiaolong, Yuan Jianmin, Lu Qisheng. Detailed-term-accounting-approximation Calculation of the Radiative Opacity of Laser-produced Al Plasma [J]. Phys Rev, 2001, **E64**: 066412.
- [7] 靳奉涛, 曾交龙, 袁建民. Al⁷⁺ 内壳层跃迁振子强度的 MCHF 计算[J]. 山东师大学报, 2000, **15**(3): 57.

Radiative Opacity of High Temperature Mg Plasma Calculated by DTA Model*

JIN Feng-tao, ZENG Jiao-long, YUAN Jian-min

(Department of Applied Physics, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The spectral resolved opacity of high temperature Mg plasma at a temperature of 56 eV and a density of 0.01 g/cm³ is calculated by the detailed term accounting (DTA) model. Saha equation is applied to obtain the population distribution of the plasma in local thermodynamic equilibrium. Atom levels and bound-bound absorption oscillator strengths are obtained from a multi-configuration Hartree-Fock (MCHF) calculation that includes Breit-Pauli relativistic correction. After considering the impact broadening and Doppler broadening, the spectral line has a Vogit profile. Bound-free and free-free absorption are also calculated by averaged atom (AA) model.

Key words: Mg plasma; radiative opacity; detailed term accounting model

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China (19974075); National Science Fund for distinguished scholars (10025416)