



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

硕士学位论文

线辐射条件下的低电离态光致电离实验光谱 的模拟研究

作者姓名：_____孙嘉宁_____

指导教师：_____王菲鹿 研究员 中国科学院国家天文台_____

学位类别：_____理学硕士_____

学科专业：_____天体物理_____

研究所：_____中国科学院 国家天文台_____

2020 年 7 月

**Spectral simulation of low-ionization photoionized plasma
produced in the laboratory using X-ray line radiation**

A thesis Submitted to

University of Chinese Academy of Sciences

In partial fulfillment of the requirement

for the degree of

Master of Science

In Astrophysics

By

Sun Jianing

Supervisor: Professor Wang Feilu

National Astronomical Observatories,

University of Chinese Academy of Sciences

July, 2020

中国科学院大学直属院系 研究生学位论文原创性声明

本人郑重声明:所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知,除文中已经注明引用的内容外,本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体,均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名: 孙嘉宁
日期: 2020.07.31

中国科学院大学直属院系 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院有关保存和使用学位论文的规定,即中国科学院有权保留送交学位论文的副本,允许该论文被查阅,可以公布该论文的全部或部分内容,可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。涉密的学位论文在解密后适用本声明。

作者签名: 孙嘉宁
日期: 2020.07.31

导师签名: 王琳
日期: 2020.7.31

摘要

在活动星系核、行星状星云、X 射线双星等天体中普遍存在着光致电离等离子体，这些等离子体在附近的强辐射源照射下其物理状态主要由辐射过程而不是碰撞过程所决定。研究此类光致电离等离子体可以了解这些天体周围等离子体的温度、密度、丰度等信息。随着实验室天体物理的发展，目前可以在实验室中构造出此类光致电离等离子体用以研究。

本文主要对 RCF (Radiative-collisional code based on the flexible atomic code) 模型进行改造，并使用改造后的 RCF 模型模拟了 2016 年 Vulcan 拍瓦激光器上进行的实验。作者完成的主要工作如下：(1) 对 RCF 模型从原子数据、计算构架、储存数据方式、数值计算方法和辐射源模块等进行改造，使原本用来计算黑体辐射场中处于稳态非局域热动平衡的光致电离等离子体的模型，现在成为可用来较快的模拟多种辐射场的模型，并且能容纳更多的量子态。原版 RCF 模型可容纳 3000 个量子态，在修改模型中矩阵的储存方式后，使得模型能够容纳 15000 个量子态。而且改造后的模型大大缩短了计算用时，例如在扩充了可容纳量子态的数量后，对包含 7633 个量子态的算例进行测试，使用原版 RCF 求解速率平衡方程的方法需要耗时 1 小时 13 分钟，随后改进了速率平衡方程的求解方法，改进后的算法仅需用时 28 秒。(2) 使用改造后的 RCF 模型模拟 2016 年 Vulcan 拍瓦激光器上进行的实验，计算了线谱辐射源照射低电离态 Ar 的光致电离等离子体的自发光谱，在模拟过程中，最多包含了 11749 个量子态、涉及 ArI~ArVII 共 7 个电离态，进行一组参数的模拟平均耗时 2 时 20 分，得到了 600 多组参数的计算结果，最终得到了较好的理论光谱，使理论光谱与实验光谱的拟合程度比起前人的结果有了明显的提高；而且计算了平均电离度、电子温度、电离态布居等数据；对谱线进行了认证，分析了光谱形成的主要机制；讨论了稳态假设与脉冲激光等离子体的适应性问题。

在光致电离等离子体的数值模拟研究中，由于电离度低、束缚电子排列组合种类繁多，需要扩充大量的原子数据，对模型和计算能力是一个不小的考验。拥有能够计算此类等离子体的模型并对实验进行成功的模拟可以增强我们对光致电离等离子体的认识，进而用以研究天体中的低电离度光致电离等离子体。

关键词：低电离度光致电离等离子体，X 射线，原子数据，电子密度

Abstract

Photoionized plasmas are common in active galactic nuclei, planetary nebulae, X-ray binary stars and others. The state of plasmas under the irradiation of a strong radiation source nearby is mainly determined by the radiation process rather than the collision process. By studying photoionized plasmas, we can understand their temperature, density, and abundance. With the development of laboratory astrophysics, photoionized plasma was constructed in the laboratory for research.

In this thesis, the RCF (Radiative-collisional code based on the flexible atomic code) model was modified, and the modified RCF model was used to simulate the experiment performed on the 2016 Vulcan PW laser. The main work was as follows: (1) Transform the RCF model from atomic data, code architecture, data storage method, numerical calculation methods and radiation source modules. The model originally used to calculate the photoionized plasma in the steady-state and non-local thermal equilibrium in the black body radiation field. It can now be used to quickly simulate a variety of radiation fields and can accommodate more quantum states. The original RCF model can accommodate 3000 quantum states. After modifying the storage method of the matrix in the model, the model can accommodate 15,000 quantum states. Moreover, the modified model greatly shortened the calculation time. For example, after the model has been expanded to accommodate quantum states, calculations containing 7633 quantum states were calculated. The calculation method of using the original RCF to solve the rate balance equation took 1 hour and 13 minutes. Subsequently, the method of solving the rate balance equation was improved, and the improved algorithm only took 28 seconds. (2) Using the modified RCF model to simulate the experiment performed on the 2016 Vulcan PW laser, the spectrum of the photoionized plasma with low ionization degree Ar was calculated. In the simulation, there were 11749 quantum states at most, involving 7 ionization states from ArI to ArVII. The simulation of a set of parameters took an average of 2 hours and 20 minutes. The calculation results of more than 600 sets of parameters were tested, and a better theoretical spectrum was finally obtained. The degree of fitting between the theoretical spectrum and the experimental spectrum has been significantly improved compared to previous results.

The average ionization degree, electron temperature, ionization state population and other data were obtained. This thesis authenticated the spectrum and analyzes the main mechanism of spectrum formation. The compatibility of steady-state and laser experiments was explained.

In the numerical simulation study of photoionized plasma, due to the low ionization degree and the wide variety of bound electron permutations and combinations, a large amount of atomic data needs to be expanded. It is a big test for models and computing power. Once there is a model that can calculate this type of plasma, it will be possible to successfully simulate experiments to promote an enhanced understanding of photoionized plasma, and it can be used to study low ionization degree photoionized plasma in celestial bodies in the future.

Key Words: Low-ionization photoionized plasma, X-ray, atomic data, electron density

目录

摘 要	I
Abstract.....	III
第一章 绪论	1
1.1 高能量密度实验室天体物理简介	1
1.2 光致电离等离子体	2
1.3 本文主要研究内容	4
第二章 理论模型	7
2.1 等离子体理论模型分类	7
2.2 基于 RCF 的模型改造	9
2.2.1 RCF 简介	9
2.2.2 模型改造	13
2.3 小结	18
第三章 Vulcan 实验光谱模拟	19
3.1 实验情况	19
3.2 理论分析	21
3.2.1 现存问题与研究目的	21
3.2.2 原因分析	22
3.2.2 处理思路	23
3.2.4 结果改进	30
3.2.5 尚有不足	37
3.3 小结	38
第四章 结论与展望	39
参 考 文 献	43
致 谢	45
个人简历、在学期间发表的论文与研究成果	47

第一章 绪论

1.1 高能量密度实验室天体物理简介

高能量密度实验室天体物理^[1]是一门兴起于上世纪九十年代的前沿交叉学科,主要依托大功率激光、磁箍缩、托克马克等装置,在实验室构造极端的物理条件,来模拟天体过程并解决相关问题,开辟了研究天体物理问题的新途径。

实验室天体物理发展到今天,研究目标范围非常广泛,包含恒星内部核反应、物态方程、天体不透明度,强辐射源附近光致电离等离子体光谱、超新星遗迹中流体力学不稳定性与无碰撞冲击波、致密天体的喷流、太阳耀斑的磁重联等^[2-4]。

在实验室天体物理的研究过程中,按照实验室和天体中参数的范围和物理过程的类比程度,实验室与天体的研究目标之间的关系大致分为:相同、相似、类似三种^[5]。“相同”是指天体环境与实验室环境完全相同,例如在实验室中构造出与恒星内部或恒星大气等离子体温度、密度一致的等离子体,用以研究恒星的物态方程、高温 X 射线热辐射发射率、不透明度等。“相似”是指在实验室中,部分参量无法与天体环境达到“相同”的程度,但是可以将这些参量按照一定的比例进行缩放,例如一些天体运动的尺度与时标远超过实验室尺度与时标,但是描述物质的动力学方程是一致的,在一定条件下,二者的物理参数能够通过标度变换^[6,7]联系起来。“类似”是指目前没有找到标度变换规律,天体环境与实验室环境的现象类似,并且二者涉及的原子过程、核反应过程相同,也能将天体与实验室中的等离子体联系起来进行研究。

随着激光技术的飞速发展,激光功率实现了飞跃式的提升。现有激光装置的功率可达太瓦甚至拍瓦量级。这样的大功率激光装置是在实验室天体物理研究中常用的一类设备。按照大功率激光装置的脉冲半高全宽(脉宽)可大致分为两类:长脉冲激光器和短脉冲激光器,二者都有独特的优势来应对不同的实验环境。长脉冲激光器的脉宽在纳秒(10^{-9} s)量级,一个脉冲包含的能量可达到千焦(10^3 J)甚至兆焦(10^6 J)量级,这样高能量激光器的开发最初是为了实现惯性约束核聚变,将大量能量聚焦到靶上,使靶提升到产生核聚变反应的物理状态。长脉冲激光器能较好地适应于天体中流体动力学相关的研究,利用长脉冲激光器研究了超新星遗迹中非线性流体不稳定性^[8-10],原初恒星的高马赫数喷流^[11-13],太阳耀斑中磁重联^[14-15];还因其与靶相互作用能产生高温辐射,可用来研究致密天体周围的光致电离星云^[16-17]。短脉冲激光器的脉宽可短到皮秒或飞秒量级(10^{-12} s- 10^{-15} s),

这种激光器最大的优势就是聚焦光强特别高。由于光强 $I[\text{W}/\text{cm}^2]$ = 到达靶面的激光能量 E / 激光脉冲的时间宽度 τ / 焦斑面积 S , 有效的降低脉宽会大幅度的提升光强, 近年来靶面的聚焦强度达到了 $10^{18} \text{ W}/\text{cm}^2$ - $10^{23} \text{ W}/\text{cm}^2$, 而长脉冲激光器的光强大约为 $10^{15} \text{ W}/\text{cm}^2$ 。在这样高强度下, 电子在激光中的振荡速度接近光速, 运动处于相对论状态, 因此这一类激光器也称为相对论激光器。利用短脉冲激光器可在实验室中研究核天体物理^[18-19]、光致电离等离子体的空心离子光谱学^[20-21]、伽马暴的相对论无碰撞冲击波^[22-23]等。

1.2 光致电离等离子体

光致电离等离子体普遍存在于活动星系核、行星状星云、X 射线双星等天体环境中。这些天体环境中都存在着强辐射场, 强烈的辐射会电离等离子体内壳层的电子, 原因在于光致电离截面反比于主量子数 n^3 , 当光子的能量超过内壳层电子束缚能, 则通过光致电离过程产生空心离子等离子体。这些等离子体通常比相同温度的等离子体具有更高的电离度, 能够产生类氢、类氦、类锂等离子。

在 X 射线双星系统中, 致密天体 (如黑洞、中子星) 吸积伴星的物质而形成吸积盘。吸积盘发出 X 射线波段的辐射谱, 伴星星风等低温物质处于这个强辐射场中, 通过光致电离过程成为光致电离等离子体, 如 (1-1) 左图, 其中包含了大量类氢、类氦、类锂离子。这类光致电离等离子体的自发辐射被 X 射线卫星观测到, 通过研究这些光谱, 可以诊断出这类天体的温度、密度、辐射场强度等物理量, 增强对 X 射线双星系统的认识。活动星系核中也大量存在光致电离等离子体, 在活动星系核中心有超大质量黑洞, 不过, 活动星系核的尺度远大于 X 射线双星, 结构也更为复杂。在活动星系核的宽线区、窄线区中充满了光致电离等离子体, 如 (1-1) 右图。其中窄线区中的光致电离等离子体电离度较低, 窄线区中 FeII 线的问题在近 20 年内一直是悬而未决的问题^[24]。活动星系核的相关研究是近几年研究的热点, 通过研究此类光致电离等离子体有望揭开活动星系核神秘的面纱。

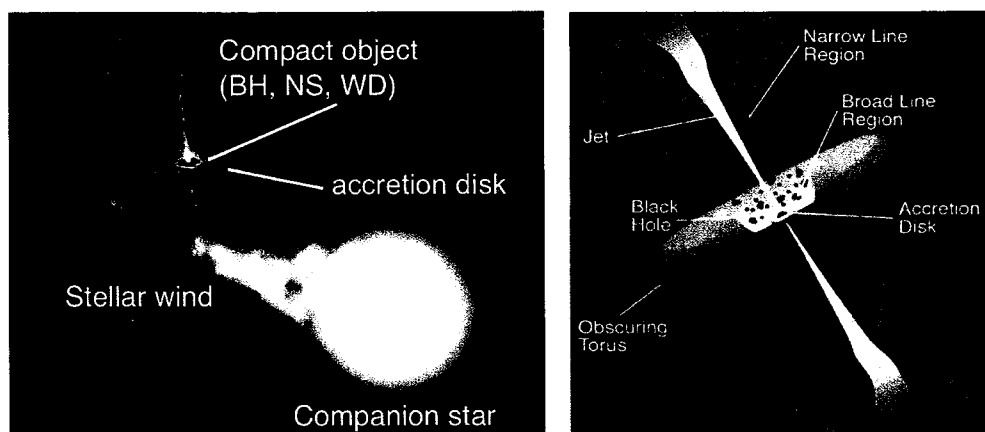


图 1-1 致密天体周围星风的光致电离等离子体（左图）^[16]；活动星系核宽线区窄线区的光致电离等离子体（右图）

在实验室中，使用长脉冲激光器可以构造与天体相类似的光致电离等离子体，2009 年 Fujioka 等人^[16]在日本 GEKKO-XII 激光装置上进行了硅（Si）的光致电离等离子体实验研究，如图（1-2），模拟 X 射线双星中的伴星星风，在实验室中得到了与天文观测相似的光谱。2017 年在中国上海光学精密机械研究所的神光 II 激光装置上也开展了光电离等离子体的实验^[25]，采用了不同的方案来构造辐射源。短脉冲激光由于其具有光强高的优势，在与靶相互作用的过程中产生能量可高达兆电子伏特的电子，电子通过靶表面等离子体场中汤姆森散射和轫致辐射过程迅速失去能量而产生 X 射线，形成几千电子伏特辐射温度的辐射场。这样的辐射场与等离子体继续相互作用，通过光致电离过程产生空心离子等离子体，可模拟天体中强辐射场中的等离子体。Vulcan 拍瓦激光器、LCLS 短脉冲激光器分别对铝的光致电离等离子体的空心离子光谱进行了实验研究^[20-21]，总结了对 KK 空心离子与 KL 空心离子产生的条件。另外 2016 年 Vulcan 拍瓦激光器还对氩（Ar）的气体靶进行了一次光致电离等离子体的实验^[26]，这也是本文进行光谱模拟研究的重点。

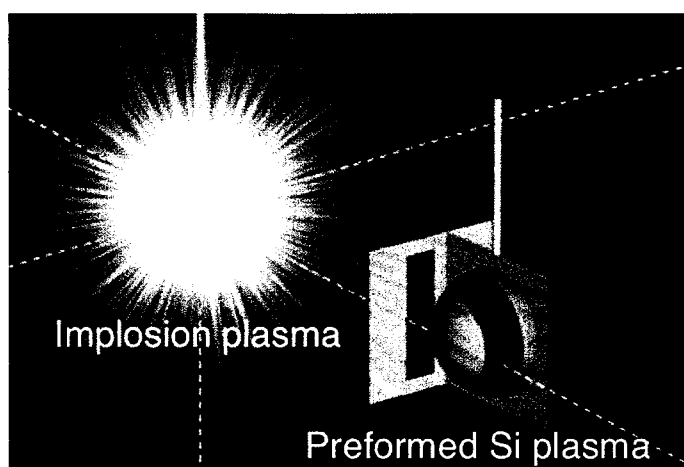


图 1-2 2009 年日本 GEKKO-XII 激光装置上进行的光致电离 Si 实验^[16]

光致电离等离子体普遍存在于天体环境中，并且可在实验室中构造出来。想要充分的认识光致电离等离子体，对光谱进行分析并解释，需要在理论上构建光致电离等离子体模型。目前已经有很多光致电离等离子体模型被提出，并广泛的应用于天文观测和实验模拟中。模型的计算方法和模型的精细程度是这一方向研究的重点和难点，而且目前对于低电离度光致电离等离子体相关的实验与数值模拟研究相对较少。天体中存在低电离度的光致电离等离子体，例如活动星系核的窄线区发射的 FeII 线，有人认为这与光致电离过程密切相关，但目前仍然难以清楚的解释其物理过程；而实验室中激光与靶相互作用的过程，必然会经过低电离度这一阶段，最终达到较高的电离度，研究激光与靶相互所用的初始阶段，这对解决等离子体产生过程的难题有所帮助。而且目前可在实验室中通过光致电离过程构造存在内壳层空穴的低电离度等离子体，这就迫切需要相应的模型来解析实验。有关低电离度光致电离等离子体理论研究的难点就在于电离度低的等离子体束缚电子非常多，这就需要在模型中扩充大量的原子数据，随之而来的问题即是计算内存不足问题和计算时长问题。本文针对低电离度光致电离等离子体，对已有模型进行改造，使其能够适应低电离度多量子态的计算，这部分内容在第二章中有详细的解释。

1.3 本文主要研究内容

本文的研究内容主要针对在激光装置上进行的光致电离等离子体实验，对实验中产生的低电离度具有空心离子的等离子体进行光谱模拟研究。得到比前人拟合程度更好的理论光谱；并对实验进行分析，诊断出部分实验参数；最后对

所用模型进行讨论,分析模型的适用性及可靠性。本文的组织结构为:第一章介绍了高能量密度实验室天体物理中光致电离等离子体的研究意义及研究现状;第二章介绍光致电离等离子体的理论模型,并对其中一种 RCF 模型进行改造,使该模型能够适应低电离度具有空心离子的光致电离等离子体的研究;第三章将改造后的 RCF 模型应用于 2016 年 Vulcan 激光器上进行 Ar 的光致电离等离子体实验^[26],得到理论光谱并诊断出部分数据,分析了实验过程和模型的优势与不足;最后第四章总结当前工作,整理改造后模型的适用范围,展望低电离度光致电离等离子体在实验与理论方面的研究方向并提出建议。

第二章 理论模型

在了解了实验室天体物理中光致电离等离子体的研究现状后，本章开始详细介绍等离子体模型，并针对现有的 RCF 模型进行改造，使模型能够快速对线谱辐射条件下包含大量量子态的低电离度光致电离等离子体进行模拟研究。

2.1 等离子体理论模型分类

研究天体或实验室中的等离子体有许多种模型，不同模型有着不同的适用范围。

当等离子体密度较高且没有外加辐射场的影响下，等离子体中碰撞过程占绝对的优势，电子服从麦克斯韦速度分布，能级密度服从玻尔兹曼分布，而电离态密度服从萨哈分布，等离子体处于动态平衡状态。动态平衡从宏观上来讲，其物理性质不随时间变化；但从微观上来讲，粒子仍然在进行剧烈的运动，只是从统计角度来看，处于不同状态的粒子分布不随时间变化。从以上三种分布涉及的物理参量来看，电子密度与电子温度可完全控制整个方程，也就意味着仅有两项参量就可描述此类等离子体，可以称此类等离子体处于局域热动平衡（Local Thermodynamic Equilibrium）。

局域热动平衡假设是一种较为理想的模型，在复杂的天体环境中，等离子体常常会偏离局域热动平衡。如等离子体碰撞不充分，或辐射过程主导了等离子体的原子过程，这时粒子难以服从上述三种分布，需要引入复杂的非局域热动平衡（Non-Local Thermodynamic Equilibrium）模型来解释等离子体。常见的模型有日冕模型、大气模型、星云模型^[27]。

自 1948 年探测到日冕发射出 X 射线以来，Elwert 在 1952 年提出了日冕模型^[27]，这是一种光学薄的，由碰撞电离和碰撞激发过程占主导的等离子体模型，而辐射复合和双电子俘获过程用来平衡碰撞电离过程以达到电离平衡。解释了日冕区域由碰撞激发过程得到高激发态并发出类氢的谱线及三重线，以及铁元素高电离态的谱线。虽然日冕区域等离子体较为稀薄，电子密度较低，但日冕的电子温度是太阳表面电子温度的数百倍，过高的电子温度使得碰撞过程占优势。这类模型还广泛的被用到其他恒星冕区，恒星耀斑结构，超新星遗迹和星系团的研究中。

另一种基于光学厚假设的大气模型^[27]，由碰撞电离过程占主导。模型以有效

温度、表面重力、丰度来描述等离子体。常用来解释 O 型星光球层，白矮星和中子星光谱，能够较好的拟合出电离吸收边的连续谱。

还有一种星云模型^[27]用来解释行星状星云发出的 X 射线。这是一种碰撞等离子体模型，既可用于光学厚等离子体也可用于光学薄等离子体，模型所用的物理参量包括电离参数、光深、电子密度、丰度。也被用来研究致密天体如黑洞、中子星、白矮星，活动星系核和恒星星风。

这三类非局域热动平衡模型对应不同的天体环境下，不同的原子过程主导的等离子体。在实际研究过程中遇到更加复杂的天体时，例如 1991 年 Vrtillek 用低分辨率光谱观测到 X 射线双星能够发射高电离态等离子体混合发射线的特征^[28]，用星云模型和日冕模型都无法合理的解释这些特征线。此时需要在模型中考虑大量的原子过程，来诊断这些特征线产生的原因，并判断此类天体的物理参量。包含了多种辐射过程和碰撞过程的模型，不能够用上述模型少量的参数进行简单地计算，通常要求解各能级、各电离态间包含激发、辐射、电离、复合等多个原子过程的速率平衡方程。

对于更一般化的非局域热动平衡等离子体，速率平衡方程如下^[29]：

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_j R_{ji} n_j - \sum_j R_{ij} n_i \quad (2-1)$$

n_i 表示第 i 个量子态的离子态布居数， R_{ji} 是第 j 个量子态变到第 i 个量子态发生原子过程的速率系数，而 R_{ij} 表示离子离开第 i 个量子态变到第 j 个量子态的速率。这样的求和足以包含了所有能级、电离态之间的变化，可以充分的描述等离子体发生的各类原子过程。

在计算非局域热动平衡速率方程时，可分为含时与不含时的两类。天体环境演化的时标远长于离子发生激发、电离、复合等过程的时标，通常等离子体是处于稳态的，会保持某一状态很长时间，针对这类等离子体的计算是不含时间参量的，这种情况下，(2-1) 公式等于 0。常用于模拟天体的计算当中。而在激光实验室中，大功率激光器是脉冲激光，等离子体的辐射环境变化很快，有些时候，原子过程的时标并非远小于激光脉冲，等离子体没有足够的时间到达稳态，这时就需要在模型中引入时间参量，(2-1) 公式等于一个随时间变化的函数，表示离子态布居是随着时间变化的。原本计算速率平衡方程就需要不小的计算量，在同样的计算能力条件下，不含时模型的计算更为细致，而含时模型需要牺牲计算的

精细程度来加入一维变量 t 。目前使用非局域热动平衡模型模拟激光实验时，有时会近似的将激光等离子体当做稳态，其目的就在于获得更精细的模拟结果，尤其关注光谱拟合时。

在光谱模拟时就需要考虑原子数据的精细程度，按照精细程度从小到大来分，有平均原子模型 (Average Atom)，超级跃迁系模型 (Super Transition Array)，细致组态模型 (Detailed Configuration Accounting)，细致能级模型 (Detailed Level Accounting)。越细致的模型，获得的计算结果越精细，越准确，但计算量也越大。

使用细致能级模型时，需要考虑每个能级上电子的跃迁、电离、复合等过程，计算量巨大。与能级有关的原子过程大致分为两类：束缚-束缚，束缚-自由。束缚-束缚过程包含光致激发、自发跃迁、碰撞激发、碰撞退激发。电子在不同能级上跃迁，吸收或发射光子，或者与自由电子通过碰撞进行能量交换，由于能级上电子一直处于束缚态，所以称为束缚-束缚过程。束缚-自由过程主要是描述电子在束缚态和自由态之间的变化，包含电离和复合过程，仔细来讲有光致电离、碰撞电离、自电离、复合辐射、三体复合、双电子俘获。除此之外，还有一些过程与能级无关，如自由-自由过程和电子散射。自由-自由过程主要是描述韧致辐射和逆韧致辐射，描述自由电子在库伦场的作用下，发射或吸收带状光谱。散射过程包含汤姆逊散射、康普顿散射、逆康普顿散射。

在实际模拟过程中，有时不必将所有原子过程包含在模型内，针对不同的等离子体的状态，挑选占主导的原子过程即可有不错的模拟效果。

2.2 基于 RCF 的模型改造

2.2.1 RCF 简介

RCF^[30] 全称 (Radiative-collisional code based on the flexible atomic code) 是一个在 Fortran 环境下开发的代码，是一个基于光学薄假设，用于计算稳态环境下、处于非局域热动平衡的光致电离等离子体自发光谱和能级布居的碰撞辐射平衡模型，并且不考虑发射光子再吸收的作用，其中原子数据来源于 FAC (Flexible atomic code)^[31]。

该模型涉及 10 个原子过程，光致激发、自发跃迁、光致电离、复合辐射、碰撞电离、三体复合、碰撞激发、碰撞退激发、自电离、双电子俘获。

自发跃迁与光致激发互为逆过程，离子从一个激发态 $X_{i,u}$ 变到另一个激发态 $X_{i,l}$ ，释放或吸收能量 $h\nu$ 的过程，可表示为：

$$X_{i,u} \leftrightarrow X_{i,l} + h\nu_{ul} \quad (2-2)$$

其中 $h\nu_{ul} = E_u - E_l$ ，是两个不同能级能量差值。在单位时间、单位体积内发生自发跃迁的次数为

$$R(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}) = N_{i,u}A_{u,l} \quad (2-3)$$

$N_{i,u}$ 是激发态 $X_{i,u}$ 的数密度， i 代表第 i 个离子态， u 代表该离子态下第 u 个量子态， $A_{u,l}$ 是 E_u 、 E_l 两个能级间跃迁的爱因斯坦系数。光致激发的反应次数表示为

$$R(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}) = N_{i,j}hJ(h\nu)B_{l,u} \quad (2-4)$$

其中 J 为辐射强度， $B_{l,u}$ 为爱因斯坦系数 B 。

光致电离与复合辐射互为逆过程。光致电离过程为等离子体受到外加辐射场的影响，高能光子有几率电离离子，使束缚电子变为自由电子。而复合辐射表示自由电子被离子捕获变为束缚电子，电子多余的能量通过辐射的形式消耗。表达式如下：

$$X_{i,u} + h\nu \leftrightarrow X_{i+1,l} + e(\varepsilon) \quad (2-5)$$

其中 $e(\varepsilon)$ 为自由电子的能量。光致电离的反应次数为：

$$R(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}) = N_{i,u} \int_{\Delta E}^{+\infty} c\sigma_{PI}(h\nu)j(h\nu)d(h\nu) \quad (2-6)$$

ΔE 是 $X_{i,u}$ 到 $X_{i+1,l}$ 的电离能， c 为真空中光速， $\sigma_{PI}(h\nu)$ 是光致电离截面， $j(h\nu)d(h\nu)$ 代表了从两个激发态间电离能 ΔE 到无穷的辐射强度微分，这样的积分意味着光子强度大过电离能，即有几率发生光致电离过程。而复合辐射的反应次数如下：

$$R(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}) = N_{i+1,l}n_e \sqrt{\frac{8}{\pi m_e T_e}} \int_0^{+\infty} E\sigma_{RR}(E)\exp\left(-\frac{E}{T_e}\right)d(E) \quad (2-7)$$

其中 n_e 、 m_e 、 T_e 分别代表了电子数密度、电子质量、电子温度， $\sigma_{RR}(E)$ 为复合辐射截面。也可从速率系数公式看出电子速率服从麦克斯韦分布。

当具有较高能量的自由电子与离子相互碰撞，伴随着能量传递，自由电子的能量传递到离子的束缚电子上，该束缚电子可能被激发到高能级，这个过程称之为碰撞激发；若是束缚电子吸收了更大的能量，变成了自由电子，这个过程称之为碰撞电离。这两个过程同样有逆过程，分别为碰撞退激发、三体复合。下面展示了碰撞激发与碰撞退激发 (2-8)、碰撞电离与三体复合 (2-9) 的表达式。

$$X_{i,u} + e(\varepsilon) \leftrightarrow X_{i,l} + e(\varepsilon') \quad (2-8)$$

$$X_{i,u} + e(\varepsilon) \leftrightarrow X_{i+1,l} + e(\varepsilon') + e(\varepsilon'') \quad (2-9)$$

碰撞激发的反应次数为:

$$R(cm^{-3}s^{-1}) = N_{i,u}n_e \sqrt{\frac{8}{\pi m_e T_e^3}} \int_{\Delta E}^{+\infty} E \sigma_{CE}(E) \exp\left(-\frac{E}{T_e}\right) d(E) \quad (2-10)$$

碰撞退激发的速率系数可通过细致平衡原则, 由碰撞激发的反应次数推导而出:

$$R(cm^{-3}s^{-1}) = N_{i,l}n_e \frac{g_{i,l}}{g_{i,u}} \exp\left(\frac{\Delta E}{T_e}\right) \sqrt{\frac{8}{\pi m_e T_e^3}} \int_{\Delta E}^{+\infty} E \sigma_{CE}(E) \exp\left(-\frac{E}{T_e}\right) d(E) \quad (2-11)$$

碰撞电离的反应次数为:

$$R(cm^{-3}s^{-1}) = N_{i,u}n_e \sqrt{\frac{8}{\pi m_e T_e^3}} \int_{\Delta E}^{+\infty} E \sigma_{CI}(E) \exp\left(-\frac{E}{T_e}\right) d(E) \quad (2-12)$$

同样也可得到三体复合的反应次数:

$$R(cm^{-3}s^{-1}) =$$

$$N_{i+1,l}n_e^2 \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e T_e}\right)^{3/2} \frac{g_{i,u}}{g_{i+1,l}} \exp\left(\frac{\Delta E}{T_e}\right) \sqrt{\frac{8}{\pi m_e T_e^3}} \int_{\Delta E}^{+\infty} E \sigma_{CI}(E) \exp\left(-\frac{E}{T_e}\right) d(E) \quad (2-13)$$

其中 σ_{CE} 为碰撞激发截面, σ_{CI} 为碰撞电离截面。

还有自电离与双电子俘获互为逆过程。当离子处于高能量的双激发态时, 并且离子的能量高于某能级电子的电离能, 此时一个电子向低能级跃迁, 产生足够高的能量将另一个处于高能级的电子电离, 这种过程称之为自电离过程。双电子俘获过程意味着一个自由电子被离子捕获, 自由电子的能量并未像复合辐射那样释放光子, 而是将低能级的电子激发到了高能级。两个过程的表达式如下:

$$X_{i,u} \leftrightarrow X_{i+1,l} + e(\varepsilon) \quad (2-14)$$

自电离过程反应次数可表示为:

$$R(cm^{-3}s^{-1}) = N_{i,u}R_{AI} \quad (2-15)$$

其中 R_{AI} 为自电离速率单位是 s^{-1} 。而双电子俘获的反应次数:

$$R(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}) = N_{i+1,l} R_{AI} n_e \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e T_e} \right)^{3/2} \frac{g_{i,u}}{g_{i+1,l}} \exp\left(\frac{\Delta E}{T_e}\right) \quad (2-16)$$

以上展示了 10 个原子过程在单位时间、单位体积内发生反应次数的公式，公式中涉及到爱因斯坦系数、截面、自电离速率、能级、简并度等原子数据均可由 FAC^[31]模型计算得到，这是一个完全相对论计算原子数据的代码，在天文计算和实验室模拟中被广为使用。另外需要在 RCF 模型中输入 4 项物理参数，有电子温度 T_e (eV) 与电子数密度 n_e (cm^{-3}) 描述了等离子体的状态，黑体辐射源的辐射温度 T_r (eV) 与稀释因子 α 描述了外加辐射场的状态，并得到上述公式中单色辐射强度 J 这一参量，其单位为 $\text{eV}/(\text{cm}^2 \text{s eV})$ ，表达式如下：

$$J(h\nu) = \frac{\alpha}{\exp\left(\frac{h\nu}{T_r}\right) - 1} \quad (2-18)$$

其中 α 与辐射源到等离子体的距离有关，与距离服从平方反比关系。

拥有了以上原子数据和代入模型的参数，可知 $N_{i,u}$ 这一项参数目前无法得知，此时模型引入了稳态假设，假设等离子体处于稳态，任何量子态的粒子数密度不随时间变化，即

$$\frac{dN_{ij}}{dt} = 0 \quad (2-19)$$

其物理意义在于：在单位时间内，处于某量子态 X_{ij} 的粒子通过不同原子过程离开其本身状态会使 N_{ij} 减少；其他量子态的粒子通过不同原子过程变为该状态会使 N_{ij} 增多， X_{ij} 的粒子数密度 N_{ij} 在这段时间内有得有失，如果 N_{ij} 满足 (2-2) 公式，意味着在一段时间内 N_{ij} 增多的数量与减少的数量相等，当所有的量子态都满足这个条件，则可认为等离子体处于稳态。

当考虑了每个量子态的粒子数密度不随时间变化，便可求出 N_{ij} 的值，即离子态布居。最后将其代入自发辐射过程便可得到等离子体的自发光谱。

由于 RCF 的计算细化到了每个电离态每个能级，模型的精细程度达到 DLA 程度，可得到非常细致的自发光谱。众所周知天体中辐射源和被其辐照的等离子体演化过程较为缓慢，绝大多数处于稳态，RCF 模型可用于模拟天体中处于强黑体辐射源的光致电离等离子体。而且使用 RCF 模型也成功模拟了大部分实验室中由脉冲激光驱动的光致电离等离子体^[30,32]。

2.2.2 模型改造

2.2.2.1 RCF 存在的困难和改造目的

RCF 模型获得了大量的科学成果。但是,在特定的实验或者天体条件下,仍需要进行必要的修改或原子数据补充。例如,RCF 默认的输入辐射源,为黑体辐射光谱,并用辐射温度 T_r 和稀释因子 α 来控制辐射强度,用于模拟天体恒星、黑洞吸积盘、实验室黑腔等黑体辐射场中等离子体环境。而活动星系核 (AGN) 的观测表明,其辐射源的谱型为幂律谱;再则,在一些实验中采用的辐射源,为某些元素自发辐射线谱,不能用黑体辐射谱来模拟。

此外,RCF 最初进行大量的模拟工作都是针对长脉冲激光器下的光致电离等离子体实验,通常这些等离子体的电离度很高,大多数为类锂、类氦离子,甚至是类氢离子^[30]。所以,计算涉及到电离态和能级数目较少,计算内存占用较低。但是对于低电离度的等离子体,核外束缚电子数量较多,考虑到这些电子在不同能级上排列组合数量巨大,动辄需要考虑几万个能级,计算内存会出现不足的情况,需要对代码框架进行优化,提升计算内存利用率。

当涉及量子态和能级的数量庞大时,不仅需要提升计算内存利用率,还需要优化算法,减少计算用时。在计算速率平衡矩阵时,矩阵的大小为 $N \times N$ 的齐次线性矩阵, N 为模型中包含所有量子态的数量。经过测试,计算 1349 个量子态的速率平衡矩阵时用时 12s;计算 7633 个量子态用时 1h3min;计算 8456 个量子态用时 1h24min,当模型包含的量子态越多,计算用时呈立方倍增加。这是因为 RCF 采用 Gauss-Jordan 算法,计算循环次数为 $N^3/3$ 。当计算量子态较少的高电离度等离子体时,计算速率平衡矩阵的用时较短,Gauss-Jordan 算法尚可使用;但等离子体电离度较低时,有必要使用恰当的矩阵数值求解方法,来减省求解矩阵的计算用时。

总而言之,为了模拟低电离态的光致电离等离子体,我们需要对 RCF 做以下修改:(1) 辐射源模型—主要是为了使模型能够计算更多复杂的辐射源辐照等离子体的情况。(2) 原子数据—主要是增加低电离态的相关数据,使得模型可用作低电离度光致电离等离子体的模拟研究。(3) 计算构架—主要是为了减少占用的计算内存,以保证加入大量低电离态原子数据时不会出现计算内存不足的情况。(4) 数值计算方法—主要是为了提高计算效率,减少计算用时。

2.2.2.2 优化改造

修改 (1): 为了计算更多复杂的辐射源辐照下的等离子体, 引入了辐射谱函数 φ 。直接将辐射谱的信息放到 φ 中。对于幂率谱辐射源, 辐射谱函数 φ 为幂率函数。当线谱作为辐射源时, 采用高斯函数进行经验性拟合。辐射谱函数 φ 如下:

$$\varphi(x) = \alpha \sum a e^{-(x-b)^2/2c^2} \quad (2-20)$$

在测到辐射源谱形后, 根据探测器相对辐射源位置与等离子体相对辐射源位置确定 α , 这是一个比例系数, 因为探测器接收到辐射光强与等离子体接收到光强不同, 但是谱形相同, 所以引入比例系数来进行调整。将线谱中每条谱线、每个线丛用高斯函数拟合, 每个峰对应一个高斯函数, x 表示光子的能量, a 是每个峰的强度, b 为线心位置, c 决定了峰的宽度。最后将多个通过测试拟合得到的高斯函数进行求和, 得到辐射源谱函数。在第三章中详细介绍了 Sn 靶的自发辐射作为辐射源, 得到谱函数的详细过程。

在计算速率平衡矩阵时, 例如光致激发过程中, 电子在两个能级间跃迁需要吸收光子的能量 x 带入 $\varphi(x)$ 中, 获得单色频率的辐射强度, 可直接代入公式 (2-4) 求得该原子过程在单位时间单位体积内的发生反应的次数。

改造后的模型能够适应多种不同辐射源辐照的等离子体, 但缺点在于构造谱函数时需要进行大量的校准工作, 人为的确定每个峰的 a 、 b 、 c 等参数, 构造出谱函数的精度有限。并且当辐射源为线谱时, 谱函数的构造非常依赖实验光谱的测量范围, 当实验测得辐射源光谱波段较短时, 其他波段光子的辐射强度为 0, 则这些波段光子所影响的光致激发、光致电离过程速率系数为 0。

修改 (2): 为了使 RCF 模型能够模拟低电离度光致电离等离子体, 加入了大量低电离态的原子数据。原子数据依旧使用 FAC 代码计算得到, 原子数据挑选的方式不同得到的模拟结果也会有差异。由于加入非常多的量子态, 在模拟时需要考虑计算内存不足的问题, 需要对离子态布居极小的量子态进行合理的删减。所以在模拟时需要不断地根据模拟结果人为的调整所包含的量子态, 而不能对模型理应包含的原子数据进行全方面的覆盖。对不同天体环境或实验室的等离子体进行原子数据筛选, 需要区别对待, 灵活调整。在第三章中详细展示了模拟 Ar 的低电离度光致电离等离子体实验时, 挑选原子数据的方法, 这里不多介绍。

修改 (3): 为了减少计算内存空间, 将原代码框架改成两步执行。第一步导入原子数据、等离子体物理量、辐射物理量, 通过计算得到每个跃迁、电离、复合过程的速率系数, 对每个原子过程进行分步计算。计算数据量庞大, 因为每个原子过程都会形成一个 N 阶稀疏矩阵 (N 为模型包含量子态总数)。当所涉及量子态越多, 计算内存占用率呈平方倍增加, 分步计算后释放内存, 保证最大程度的利用计算内存。分块后的代码通过循环结构, 在每计算出一个速率系数时, 直接导出一个坐标为 (Ni, Nj) 的速率系数 (占用了两个整型变量和一个双精度变量), 代表从第 i 个量子态通过跃迁、电离或复合过程变到第 j 个量子态的速率, 如果速率为 0 时, 则不导出这个坐标, 这样做同样是为了有效的利用计算内存空间。导出十个原子过程产生的十个 N 阶稀疏矩阵, 占用的是硬盘的存储空间, 所以释放了大量的计算内存空间。第二步开始计算速率平衡矩阵, 读入上一步导出的十个稀疏矩阵, 按照坐标依次放到速率平衡矩阵中, 将十个 N 阶稀疏矩阵合为一个 N 阶速率平衡矩阵, 之后求解矩阵。这样调整代码框架, 保证了在计算包含大量量子态时, 计算内存足够。

其优点在于将占用的计算内存改为占用计算机硬盘存储空间, 并尽可能的在每一步计算中提高计算内存空间的利用率, 较大的提升矩阵可容纳的量子态; 缺点在于增加了计算框架的额外循环、导出、读取过程, 但经过测试, 额外增加的时间对整个代码运行的时间来讲几乎可以忽略。

修改 (4): 改进了计算速率平衡矩阵的数值计算方法。上文提到使用 Gauss-Jordan 算法, 将速率平衡矩阵转为对角矩阵, 得到布居。在计算低电离度等离子体时, 要对矩阵求解算法进行优化, 将解法改进为 LU 分解法^[33], 并采用 Python 中 sympy 模块的 LU 分解法优化包。下面介绍 LU 分解法的运算步骤:

有矩阵运算 $Ax=B$, 令 $A=LU$, 则 $LUx=B$

为了方便演示, 先假设 A 、 L 、 U 为 4 阶矩阵

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

按照矩阵运算法则, 可知:

$$\begin{cases} l_{11} = a_{11} \\ l_{21} = a_{21} \\ l_{31} = a_{31} \\ l_{41} = a_{41} \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{11}u_{12} = a_{12} \\ l_{11}u_{13} = a_{13} \\ l_{11}u_{14} = a_{14} \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{21}u_{12} + l_{22} = a_{22} \\ l_{31}u_{12} + l_{32} = a_{32} \\ l_{41}u_{12} + l_{42} = a_{42} \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23} = a_{23} \\ l_{21}u_{14} + l_{22}u_{24} = a_{24} \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23} = a_{23} \\ l_{21}u_{14} + l_{22}u_{24} = a_{24} \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33} = a_{33} \\ l_{41}u_{13} + l_{42}u_{23} + l_{43} = a_{43} \end{cases}$$

$$l_{31}u_{14} + l_{32}u_{24} + l_{33}u_{34} = a_{34}$$

$$l_{41}u_{14} + l_{42}u_{24} + l_{43}u_{34} + l_{44} = a_{44}$$

按照顺序, 可得到全部 $\mathbf{L}$ 和 $\mathbf{U}$ 的矩阵元, 给出矩阵元的一般公式:

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} \quad i, j = 1, 2, 3, 4 \quad i \geq j \quad (2-21)$$

$$u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj})/l_{ii} \quad i = 1, 2, 3 \quad j = 2, 3, 4 \quad i < j \quad (2-22)$$

令 $\mathbf{Ux}=\mathbf{y}$, 则 $\mathbf{Ly}=\mathbf{B}$

$$y_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k)/l_{ii} \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (2-23)$$

将 y 代入 $\mathbf{Ux}=\mathbf{y}$, 得到 x 的表达式:

$$x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik}x_k \quad i = n, n-1, n-2, \dots, 1 \quad (2-24)$$

至此求出了 $\mathbf{Ax}=\mathbf{B}$ 的解, 现在回到速率平衡方程。由公式 (2-2) 可知 $\mathbf{B}$ 为 n 行 1 列的零矩阵, $\mathbf{A}$ 为求出的速率系数矩阵, 解得 x 为布居数。即可知道整个等离子体中每个不同量子态所占比例。改进了矩阵求解方法, 大大的减少了计算速率平衡矩阵的用时。

2.2.2.3 改造后模型的效果

经过一系列改造, RCF 目前可以用来计算多种辐射源下低电度的等离子体, 扩大了模型的适用范围。节省计算内存空间使得可以在计算中加入更多的量子态, 目前使用 4GB 内存的计算机可容纳 15000 个量子态的计算, 是之前代码容纳量子态的 5 倍, 用来适应低电离度、存在多束缚电子的等离子体。速率矩阵的计算用时也大大减少, 经过测试, 在包含 7633 个量子态的速率平衡矩阵计算中, 原 RCF 计算速率矩阵用时 1h3min, 而改进后的 RCF 用时 28s。

以包含 7633 个量子态的算例展示每个模块计算用时, 如下表:

表 2-1 改造后 RCF 每个模块计算用时。

计算流程	计算内容	用时
第一步	自发跃迁 光致激发	31s
计算速率系数	自电离 双电子俘获	38s
	碰撞激发 碰撞退激发	59min 55s
	碰撞电离 三体复合	59s
	光致电离 复合辐射	1h 13min 48s
第二步	读入上述速率系数	24s
计算平衡方程	计算速率平衡矩阵	28s (原来 1h3min)
第三步	计算光谱	12s

由表 (2-1) 得知, 改造后的 RCF 通过将速率系数导出后再读取的方法, 虽然减少了计算内存的占用, 但是会额外增加导出、读取的循环, 会增加代码运行时间。通过测试, 包含 7633 个量子态的计算中, 将所有原子过程的速率系数导入速率平衡矩阵时, 共计用时 24s, 不足一分钟, 对于整个代码运行所用的时间来说微不足道。目前代码计算用时主要计算速率系数模块占用。其中自发跃迁、

光致激发和自电离、双电子俘获过程用时极少，其原因在于计算公式简单，如公式 (2-3) (2-4) (2-15) (2-16)。由 FAC 模型得到爱因斯坦系数与自电离速率，可直接获得以上速率系数。而剩余碰撞激发、碰撞退激发、碰撞电离、三体复合、光致电离和复合辐射过程需要由 FAC 计算得到这六个过程的截面，并通过积分算出速率系数，这就导致了计算用时较长，参考公式 (2-6) (2-7) (2-10) (2-11) (2-12) (2-13)。值得注意的是在此算例中，碰撞电离与三体复合的速率系数计算用时极少，其原因在于此算例中包含的量子态是人为挑选的，挑选的这些量子态相互之间能够发生碰撞电离过程的数目很少，所以这样的结果受人为因素影响，不能错误的认为：发生碰撞电离过程的概率极小。下一章重点介绍针对同样状态的等离子体，但加入更多量子态的模拟过程，得到的光谱、离子态布居等结果，这里不再赘述。

2.3 小结

采用不同的等离子体模型得到的计算结果会产生差异，针对不同的研究目标，需要采用恰当的模型来进行模拟。

本文研究重点是针对短脉冲激光器上进行的一次光致电离等离子体实验，采用线谱辐射源与 Ar 等离子体相互作用，产生了低电离度的光致电离等离子体。光致电离等离子体因其受到强烈的非普朗克分布辐射场的影响，需要考虑非局域热动平衡效应；因为重点关注其自发光谱，所以采用精细程度最高 DLA 模型得到的原子数据；考虑到进行光谱拟合时需要代入大量的量子态，故而对 RCF 模型进行改造。

改造后的 RCF 较为适应该实验中的等离子体，实验的辐射源为 X 射线波段的线谱，等离子体的平均电离度约为 3~4，产生了大量与内壳层电子跃迁有关的 $K\alpha$ 线。模型中最终包含了 11360 个量子态，一次模拟计算大约用时 2h20min。

下一章详细介绍利用改造后的 RCF 模型模拟一项低电离度等离子体实验的光谱。

第三章 Vulcan 实验光谱模拟

RCF 模型的改进（见第二章）完成后，对 Vulcan 拍瓦激光器上的光致电离等离子体实验进行了模拟，模拟结果与等离子体自发光谱符合得比较好，并且通过分析实验过程中的主要原子过程，推知了等离子体的电离态布居，在此基础上分析了该实验光谱的主要形成机制。

3.1 实验情况

该实验是 2016 年在英国卢瑟福实验室 Vulcan 拍瓦激光器上进行的^[26]。采用了 Hill 和 Rose 建议的辐射源方案^[34]，用强线谱代替常规的宽带准黑体谱作为辐射源，并且强线处于 X 射线波段，可等效为约 1KeV 辐射温度的辐射源，用来研究强辐射源环境中光致电离等离子体，在这种情况下内壳层光致电离过程占有优势，从而产生空穴离子的发射谱。

实验将能量 700J、脉宽 1ns、波长 527nm 的激光辐照到锡（Sn）靶上，发射出的 X 射线，作为辐射源，辐照到一个密闭的气室，气室中注有氩气。通过注入氩气的多少，来控制氩气的压强。气室的四个方向有透明的小窗，窗外放置光谱仪，来接收实验产生 Ar 等离子体的自发光谱。图（3-1）展示了实验设备布局，图（3-2）展示了激光与 Sn 靶相互作用而产生的 X 射线波段自发光谱。由于辐射源光子能量高于 Ar 的 K 壳层电离能，通过辐射过程电离 Ar 的 K 壳层电子，从而产生带有内壳层空穴的 Ar 离子。但由于辐射源仅是线谱，并非宽带的辐射

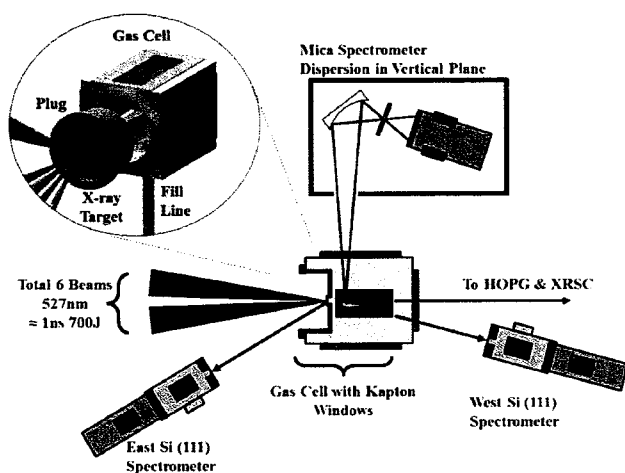


图 3-1 Vulcan 拍瓦激光实验布局^[26]

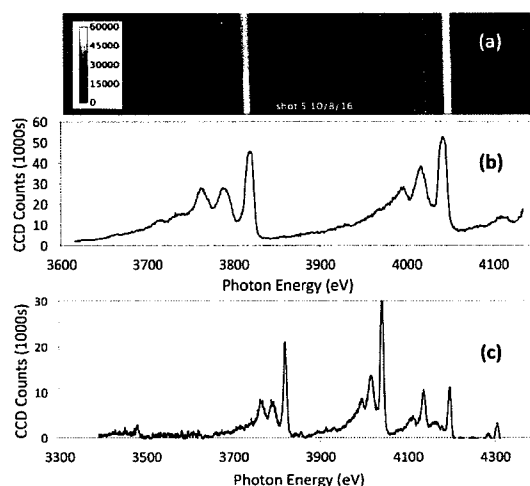
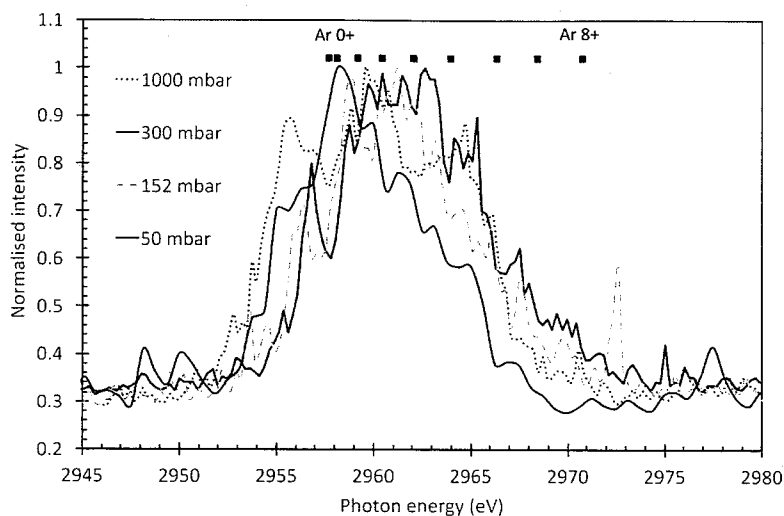
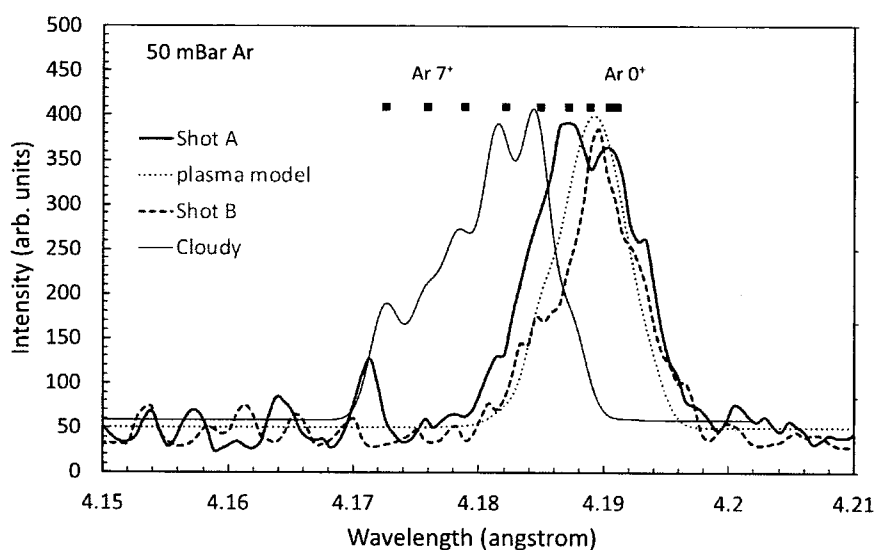
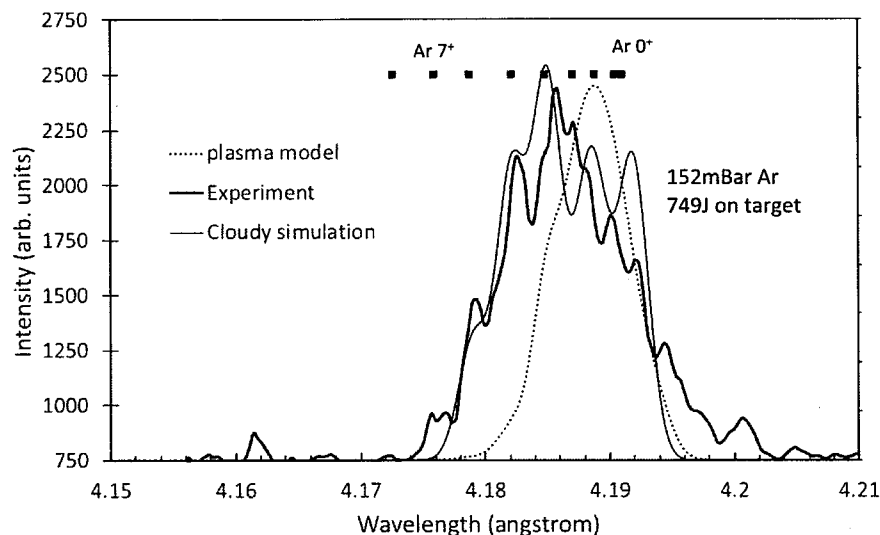


图 3-2 Sn 自发辐射光谱作为辐射源^[26]


 图 3-3 不同气压下 Ar 等离子体自发辐射光谱^[26]

 图 3-4 模拟 50mbar 气压下 Ar 的自发光谱^[26]

源，总体辐射能量比起等效的 1KeV 辐射温度的宽带准黑体谱的辐射能量要低，使得对等离子体加热程度并不如常用的黑体辐射源，电子温度不足 20eV 导致 Ar 的外壳层电子通过碰撞电离过程变为自由电子的几率变得较低，而模拟结果表明碰撞电离过程确实不占主导地位。这样的实验布局保持了低电离度的等离子体特性。通过调整气室的气压（50mbar、152mbar、300mbar、1000mbar），实验得到了不同气压下的自发光谱如图（3-3）。

图 3-5 模拟 152mbar 气压下 Ar 的自发光谱^[26]

White 等人^[26]利用 plasma model 和 Cloudy 等离子模型对 50mbar 和 152mbar 的自发光谱进行了初步的实验分析，而理论模拟与实验的结果存在明显的差异，如图（3-4）和图（3-5）。

文章^[26]给出了气压 50mbar 的平均电离度为 3；气压 152mbar 的平均电离度为 4，这是根据图（3-3）中，上方标记 $K\alpha$ （红点）与光谱轮廓进行对比得到的估值，这也说明了文章所用的等离子体模型没有涉及到量子态层面，不能通过模型给出一个较为准确的平均电离度，这需要足够精细的模型来模拟光谱。

通过分析图（3-3），实验改变了不同的气压得到了不同的光谱，但这四个光谱的轮廓都集中在 2950eV~2970eV 中间，对比图上标记的 $K\alpha$ 线位置，大致可以预估出实验中 Ar 等离子体主要由 ArI~ArVIII 组成，这表明了整个实验产生的等离子体电离度较低。由于 Ar 原子核外有 18 个电子，这就意味着需要模拟的 Ar 离子至少包含 10 个束缚电子，这就导致了在模型中代入原子数据时，需要考虑不同电离态中数以万计的量子态，对这样的等离子体进行模拟具有相当大的难度。

3.2 理论分析

3.2.1 现存问题与研究目的

根据上节对实验分析的介绍，我们认为有如下问题仍需研究：

(1) 文章中只粗略的标出了不同离化态 Ar 对应 $K\alpha$ 线的谱线位置, 谱线的证认比较粗糙;

(2) 理论模型没有给出电离态分布的情况;

(3) 关于光谱形成的主要机制, 模拟并没有定量分析等。

根据以上问题, 本文采用 DLA 层次的原子模型, 通过求解稳态速率方程, 对实验过程进行模拟。通过与实验光谱进行比较, 分析其观测光谱的组成, 得到等离子体的离子态布居, 研究线谱辐射源对低温等离子体状态的影响, 对此类非局部热动平衡的等离子体性质加深理解。

3.2.2 原因分析

针对以上列举的问题, 可能的原因有: (1) 文章采用模型精细程度不足, 导致理论光谱明显的缺乏光谱细节 (2) 文章模型没有处理好稳态模型与激光实验的差别, 某些情况下, 稳态模型可以直接用于激光实验, 有时需要进行人为的修正。

我们讨论了拟合程度不佳的原因, 其一就在于模型的精细程度不足。据文献可知^[26], 在模拟光谱时, 并没有对每个量子态的离子进行分析, 而仅是对某个电离度所有离子整体分析。并且文献[26]给出的气压 50mbar 的平均电离度为 3; 气压 152mbar 的平均电离度为 4 也是通过将实验光谱与 $K\alpha$ 线位置对比得到的估值, 这也说明文献[26]所用的等离子体模型没有细致的考虑到能级层面, 无法通过电离态布居计算得到平均电离度。而且上文提到实验中一个 Ar 离子的束缚电子至少 10 个以上, 需要考虑的量子态数以万计, 这时需要使用精细程度够高, 且能容纳量子态数量极高的模型来拟合光谱。这也是本文改造 RCF 模型的目的: 为了使用合适的模型得到拟合程度较高的理论光谱。并且实验光谱是唯一能够携带出等离子体信息的重要参照, 拟合程度不佳的结果始终不能强有力的解释实验。

其二, 在模拟实验时, 使用稳态模型模拟激光等离子体, 要考虑到整个实验过程能否到达稳态, 实际实验过程偏离稳态的程度有多大, 如何通过参数调整, 才能使稳态模型足以合理的解释实验。我们认为当实际光致电离等离子体偏离稳态程度较大时, 需要人为的增强光致电离过程的逆过程----复合辐射过程, 来使实验达到碰撞-辐射平衡。这样做的理由放到下节详细讨论。

基于以上分析，我们采用改造后的 RCF 模型模拟了实验光谱，得到了较好的模拟光谱和部分可靠的诊断数据。

3.2.2 处理思路

经过以上的分析，我们打算从以下方面展开模拟研究：（1）原子数据方面，尽可能的包含实验中涉及的主要量子态。上文已经说明对低电离态等离子体的模拟需要包含非常多的量子态，并且考虑到计算能力有限，需要通过经验和测试来确定在模型中加入哪些量子态。（2）数值计算方面，采用改造的 RCF 模型进行模拟，这样用稳态模型得到的模拟光谱能展示出更多的光谱细节。在模型中选用合适的原子数据，并且调整辐射源参量、电子温度、电子密度，通过不断地调整参数使模拟光谱更贴近实验光谱，并选择拟合程度最佳的模拟光谱来确定各项参数。（3）参数调整方面，根据实验介绍得知实验中唯一变量为填充 Ar 气的气压，辐射源参数固定不变，电子温度变化不大，则通过调整电子密度这一参数，使模拟光谱符合实验光谱，并得到可靠的电离态分布等；从模拟结果认证谱线并分析光谱形成的主要机制。下面开始详细介绍模拟思路。

使用改造后的 RCF 模型保证了模拟光谱的结果足够精细。DLA 模型需要考虑到每个能级，所以对原子数据进行合理的挑选是成功模拟光谱的必要条件。

具体的确定等离子体包含量子态方式：先从实验光谱的范围确定电子的主要跃迁，接着通过查询数据库确定等离子体电离态，最后考虑内壳层电子排布、外壳层电子排布逐渐缩小需要加入模型的量子态范围，剔除布居较小的部分量子态。

已知 Ar 原子核外有 18 个束缚态电子，当 Ar 处于低电离态时核外束缚电子较多，相比起高电离态的类氢、类氦、类锂离子来说，核外束缚电子可排列组合的数目是非常大的。整个模拟过程的计算量十分大，所以需要提前删去离子态布居非常小的不重要的量子态，来减省计算量。

首先根据实验光谱所在波段（2945eV~2980eV），并参考 NIST 数据库判断出这些光子都是通过 Ar 等离子体内壳层电子跃迁所产生的。如表（3-1）所示，展示了 Ar 元素在 K、L、M 壳层间跃迁产生光子的能量，足以判断出这个波段的光子主要来源于 L 壳层到 K 壳层之间的跃迁，属于 Ar 元素的 $K\alpha$ 线。

表 3-1 NIST 数据库展示 Ar 不同壳层间的能量差

壳层间跃迁	能量 eV	参考
KL_1	2880.13(33)	
KL_2	2955.89(43)	2955.566(16)
KL_3	2957.90(42)	2957.682(16)
KM_1	3177.4(15)	
KM_2	3191.31(58)	3190.49(24)
KM_3	3191.47(58)	3190.49(24)
K 电离	3207.44(12)	3202.933(61)
L_1M_1	297.3(16)	
L_1M_2	311.18(69)	
L_1M_3	311.35(69)	
L_1 电离	327.31(23)	
L_2M_1	221.5(17)	221.79(59)
L_2M_2	235.41(78)	
L_2M_3	235.58(78)	
L_2 电离	251.55(32)	
L_3M_1	219.52(77)	220.22(58)
L_3M_2	233.40(77)	
L_3M_3	233.57(77)	
L_3 电离	249.54(31)	

接着使用 FAC 模型计算出每个电离态基态的 $K\alpha$ 线的光子能量进行光谱定标, 数据记录到表 (3-2)。发现实验光谱中一些强烈的谱线是在 ArI (2957.58eV)

到 ArVII (2966.35) 基态 $K\alpha$ 线的范围内, 意味着电离度是比较低的。通过对比定标的 $K\alpha$ 线和实验光谱, 发现实验的光谱峰值并非准确的对应到不同电离度基态 $K\alpha$ 线的位置上, 峰值的位置有不同程度的偏移, 并且谱线有不同大小的半高全宽。

表 3-2 不同电离态基态 $K\alpha$ 线的位置

电离态	ArI	ArII	ArIII	ArIV	ArV	ArVI	ArVII
基态位置 (eV)	2957.58	2958.00	2959.18	2960.47	2962.08	2964.10	2966.35

在确定了等离子体电离度的大致区间后, 开始考虑离子的电子排布情况, 来进一步确定等离子体包含的量子态。我们认为实验中 Ar 等离子体的内壳层电子排布结构是相差不大的, 都是与 Ar 的 $K\alpha$ 跃迁相关, 所以谱线能够集中在 2945eV~2980eV 波段; 外壳层电子被激发到不同的能级上, 由于外壳层电子排布结构不同, 会对所有束缚电子有微量的库仑力作用, 使得内壳层能级有一定程度的偏移。这时, 内壳层电子跃迁产生的光子, 会远离基态谱线向高能端移动。并且因为外壳层电子排列组合的数量十分巨大, 所以会有无数的谱线排布在基态谱线的右侧, 产生了相当复杂的光谱。总的来讲, 内壳层电子能级距离较远, 不同的电子排布决定了谱线所在位置; 外壳层电子能级距离较近, 不同的电子排布影响了谱线最终的偏移和宽度。

在考虑离子的电子排布时, 首先要确定内壳层的电子排布。很难通过理论直接得到实际情况中不同量子态的布居, 我们采用了测试法, 在最初组态选取时只包含了不同电离度基态 $K\alpha$ 线, 并且逐步扣除 L 壳层和 K 壳层的电子, 将这些量子态放入改造后的 RCF 中, 得到简略的模拟光谱, 最终发现, 内壳层电子排布重点只需要考虑两种情况, 即 $1s^22s^22p^5$ 和 $1s^12s^22p^6$, 2p 上一个电子跃迁到 1s 空穴上, 即会产生 $K\alpha$ 线。假如 L 壳层上任何一个能级多失去一个电子, 如 $1s^12s^22p^5$, $K\alpha$ 线的位置会偏移到 2970eV 附近; 假如 K 壳层上再多失去一个电子, $K\alpha$ 线会偏移的更远。(3-6) 图展示了包含 324 个量子态模型得到的模拟光谱, 涉及 ArI~ArVII 共 7 个电离态, 这些量子态的外壳层电子排布暂且设定一致, 而内壳层电子有多种排布方式, 包括 K 壳层上电子存在 0、1、2 个, L 壳层上电子存在 0~8 个。这样的测试, 由于涉及量子态极少, 光谱细节难以辨认; 但

这样做主要是为了通过对比光谱轮廓位置，确定电子内壳层排布情况。如(3-6)左图代入实验对应气压 50mbar 情况的参数，可以发现低能端光谱轮廓拟合程度较好，但是峰值的位置有偏差，这是因为固定了外壳层电子排布，没有谱线偏移效应。随着降低电子密度（如右图），会发现右边的峰的强度会增加，较高电离态的谱线会增强，并且发现 2977eV 处的峰对应内壳层电子排布主要包含 $1s^12s^22p^4$ 到 $1s^22s^22p^3$ 的跃迁。当更关注实验光谱的波段，并且为了尽可能的减少计算量，可以将 $1s^12s^22p^4$ 和 $1s^22s^22p^3$ 剔除。通过同样的方法对不同内壳层电子排布在理论光谱上所对应的波段进行测试，筛选掉一些不太重要的内壳层电子排布方式。最终经过大量测试，为保证所涉及不同量子态间跃迁发出光子主要集中在 2945eV~2970eV 范围内，最终确定了内壳层电子排布仅有 $1s^12s^22p^5$ 和 $1s^12s^22p^6$ 两种情况。

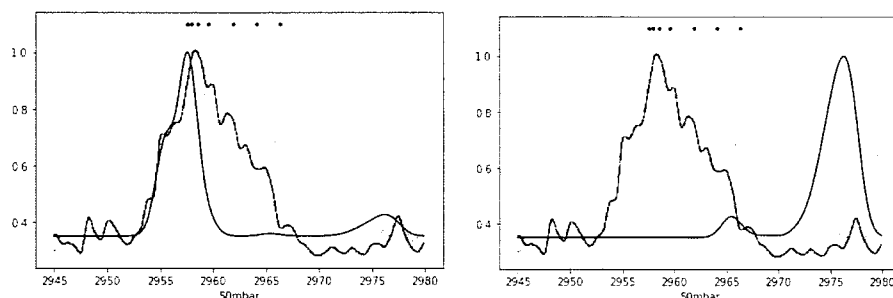


图 3-6 包含 324 个量子态模型得到的简要光谱。红线对应气压 50mbar 的实验光谱，黑线为 RCF 模拟光谱，电子温度为 15eV。左图电子密度 $3.6 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$ 右图电子密度为 $3.6 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ 。

内壳层电子排布的组态确定了后，开始考虑外壳层电子排布情况。由于辐射源是 X 射线波段的线谱（其余波段光强设置为 0），并且自发辐射平均自由程大于等离子体尺度的理想情况下，光致激发过程在这样的理想条件下是不存在的，外壳层电子的激发是由于热电子碰撞激发引起的。这时，我们考虑了基态、价壳层电子的单激发态、部分双激发态，其中单激发态电子最高设置到了 7p 能级，双激发态最高设置到了 4p 能级。这样的设计是经验性的，主要包含了较大激发几率的能级并考虑有限的计算能力，实际情况应该包含更多的能级，更多的激发态。

通过这样的方式，最终确定了模型中包含的量子态。理论上应该完备所有能级间的跃迁，依靠速率平衡方程自恰排除布居少的量子态，但由于计算能力有限，

只能根据经验和测试对照实验光谱，提前批量排除大部分量子态。这样设置组态，最终计算得到 11360 个量子态的原子数据，代入改造的 RCF 模型中，即使这样，计算量也是比非常大的。

有了恰当的原子数据，将其代入改进的 RCF 模型中，接着确定辐射源谱函数。在实验中，激光器与作为辐射源的 Sn 靶是没有更换的，故此我们在模拟中将辐射源的参数固定不变，其中用来描述辐射源的谱函数上节已经介绍过了，这里给出针对本次实验的谱函数，用 python 代码编译，如图 (3-7)。

```
def EVGAUSS (XXXX):
    if 3300<XXXX<4300:
        EVGAUSS=0.
        EVGAUSS=EVGAUSS+9000*2.71828**(-(XXXX-3766)**2/2/(43**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+14526*2.71828**(-(XXXX-4005)**2/2/(44**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+9000*2.71828**(-(XXXX-4135)**2/2/(50**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+4500*2.71828**(-(XXXX-4060)**2/2/(20**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+3100*2.71828**(-(XXXX-3890)**2/2/(20**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+1800*2.71828**(-(XXXX-3920)**2/2/(10**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+1840*2.71828**(-(XXXX-4255)**2/2/(13**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+840*2.71828**(-(XXXX-4207)**2/2/(13**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+5000*2.71828**(-(XXXX-3475)**2/2/(2**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+10700*2.71828**(-(XXXX-3764)**2/2/(4**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+10150*2.71828**(-(XXXX-3790.5)**2/2/(5**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+45000*2.71828**(-(XXXX-3819)**2/2/(3.5**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+6000*2.71828**(-(XXXX-3994)**2/2/(4**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+18000*2.71828**(-(XXXX-4016)**2/2/(4.5**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+59000*2.71828**(-(XXXX-4041)**2/2/(3.5**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+4200*2.71828**(-(XXXX-4111)**2/2/(6**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+17200*2.71828**(-(XXXX-4136)**2/2/(3**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+3200*2.71828**(-(XXXX-4166)**2/2/(5**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+23200*2.71828**(-(XXXX-4197)**2/2/(3**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+4840*2.71828**(-(XXXX-4286)**2/2/(6**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS+10000*2.71828**(-(XXXX-4306)**2/2/(4**2))
        EVGAUSS=EVGAUSS*XXXX*(1.43E+13)*1E6
        return EVGAUSS
    else:
        return 0.
```

图 3-7 用 python 代码编译的谱函数。

首先，谱函数由分段函数组成，在 3300eV~4300eV 范围外辐射强度为 0，与实验辐射源的波段对应；在 3300eV~4300eV 范围内包含大大小小 15 个峰用高斯函数拟合，另外用 6 个高斯函数进行修正。在整个代码中以子函数的形式，构造

谱函数，当填入不同的谱线位置（上图“XXXX”），即可得到该谱线位置的辐射强度（上图“EVGAUSS”）。图（3-8）展示了整个谱函数与实验给出的辐射源光谱对比。

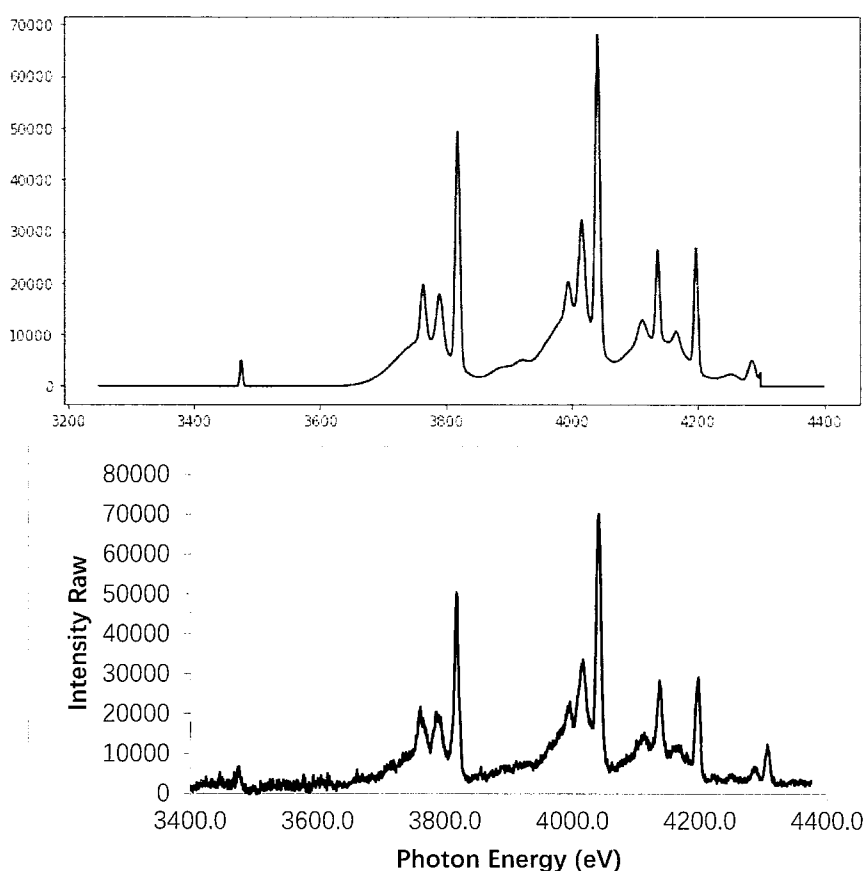


图 3-8 上图为模型中代入的辐射源谱函数，下图为实验测得辐射源光谱数据^[26]。

另外需要注意，实验中用来收集辐射源光谱仪位置处的辐射强度并不等于 Ar 等离子体处的辐射强度，但可以确定两处的辐射强度的谱形是相同的。所以引入一个比例系数 α 来换算光谱仪处辐射强度与 Ar 等离子体处辐射强度的大小，如公式（3-1）：

$$I_{Ar \text{ 等离子体}} = \alpha I_{\text{光谱仪}} \quad (3-1)$$

这一参量 α ，通常与等离子体或光谱仪到辐射源的距离和被辐照的面积大小决定，所以需要考虑到实验中仪器的具体位置与仪器接收辐射的面积，这里无从

得知，只能将其当作一个自由参数被测试出来。

最终在模拟时，调整 3 个自由参数来拟合光谱，分别是比例系数 α 、电子温度 T_e 、电子密度 n_e 。而这三个自由参数的调整也是有限制的，例如比例系数是讲辐射源辐照到 Ar 等离子体处的辐射强度与光谱仪接收辐射源的辐射强度的比值，在实验室较小的空间内，两处辐射强度虽然有差别，但一定相差不大，所以 α 不会太大也不会太小，数值上接近于 1。电子温度主要控制着不同原子过程的速率系数，如公式 (2-3) ~ (2-16)，是一项较为关键的参数，尽可能与实验给出的参数相符。而电子密度这一项参数用于速率平衡矩阵中，其实稳态假设对于脉冲激光等离子体并不是非常合适的假设，尤其当等离子体偏离稳态较远时，采用实验给出的电子密度参数可能无法计算出较好的理论光谱，所以这里我们放宽了电子密度的限制，电子密度从较大的数值范围内挑选。从理论上讲，在可改动的自由参数中，最合理的改动方式即是改变电子密度，如公式 (2-6) (2-7)，将光致电离过程、复合辐射过程在单位时间、单位体积内发生次数的公式进行变形，如下：

$$\begin{aligned} R(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}) &= N_{i,u} \int_{AE}^{+\infty} c\sigma_{PI}(h\nu)j(h\nu)d(h\nu) \\ &= N_{i,u}r_{PI} \end{aligned} \quad (3-2)$$

$$\begin{aligned} R(\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}) &= N_{i+1,l}n_e \sqrt{\frac{8}{\pi m_e T_e^3}} \int_0^{+\infty} E\sigma_{RR}(E) \exp\left(-\frac{E}{T_e}\right) d(E) \\ &= N_{i+1,l}n_e r_{RRRT} \end{aligned} \quad (3-3)$$

其中 r_{PI} 代表了光致电离的速率系数， r_{RRRT} 代表了复合辐射的速率系数，单位为 s^{-1} 。由 (3-2) 和 (3-3) 公式可知电子密度仅影响复合辐射过程，并且直接参与到速率平衡方程 (2-1) 和 (2-19) 中。这样做的话，与电子密度有关的其他原子过程也会相应的增强，其中有碰撞激发 (2-10)、碰撞退激发 (2-11)、碰撞电离 (2-12)、三体复合 (2-13)、双电子俘获 (2-16)，其中碰撞电离过程与三体复合过程还有双电子俘获根据原子数据来看，他们在此实验中不占主导地位，提高电子密度造成的影响可以忽略；至于碰撞激发和碰撞退激发不会影响电离平衡，所以对电子密度这样的改动，模拟结果与实际情况偏差不会太大。但这样得到的复合辐射产生的连续谱也不具备研究意义，辐射强度会比实际情况偏高。这

样做并不会对不含电子密度的原子过程造成影响，如等离子体的自发辐射过程，如公式 (2-3)，所以得到等离子体的自发光谱是具有可信度的。

综上，介绍了对实验的模拟思路，并进行大量调整参数的工作，来拟合实验光谱，下一节介绍得到拟合程度较好的理论光谱，并讨论新的结果。

3.2.4 结果改进

在以前的工作中^[26]，气压为 50mbar 情况下，Cloudy 模型得到理论光谱峰值对应的波长明显比实验测量到的峰值波长要小；而在 152mbar 情况下，Cloudy 给出的模拟光谱整体轮廓相符，只是个别谱线的位置与相对强度有一定差距。对 50mbar 气压下的等离子体，plasma model 计算的光谱与实验基本符合，但缺乏光谱细节。我们经过扩充原子数据和优化算法后，得到了气压为 50mbar、152mbar 条件下的理论光谱，其与实验光谱的拟合程度有了明显的提高，如图 (3-9)。

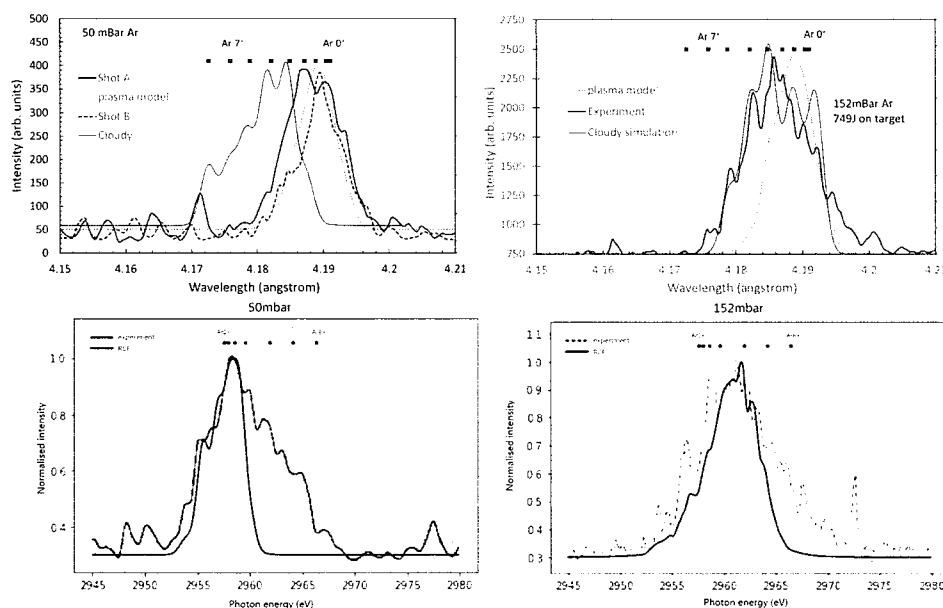


图 3-9 不同模型模拟 50mbar 和 152mbar 气压下 Ar 的自发光谱。左上图为文献^[26]模拟得到气压 50mbar 的光谱；左下为改造后 RCF 模拟得到气压 50mbar 的光谱；右上图为文献^[26]模拟得到气压 152mbar 的光谱；右下图为改造后 RCF 模拟得到气压 152mbar 的光谱。

在气压为 50mbar 时，理论计算得到的 2945-2980eV 的光谱，经与实验观测相比较后发现，在 2958eV 和 2955eV 处两者的强度相符，而在 2960eV-2965eV 区间的光谱无法拟合。

气压为 152mbar 时，理论计算光谱与实验光谱的比较如 (3-10) 右下图。2958eV 与 2956eV 附近的峰虽然在光谱中出现，但是辐射峰值强度仅为实验光谱的 70% 左右。这里，改造后的 RCF 中输入参数中电子温度设为 18eV，电子密度为 $1.90 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ 。模拟还给出了电离态分布，图 (3-10)，横坐标表示电离度，纵坐标表示不同电离态离子数占总离子数的比例，各个电离态的相对比例之和等于 1，由图可以发现其中 Ar IV、Ar V、Ar VI 的离子占主导地位。这与之前工作^[26]中对电离态分布和电子温度的含时模拟结果基本符合，如图 (3-11) 所示。在激光光强达到最大时（即 0.75ns）时，Ar IV 离子最多，接着是 Ar V 和 Ar VI 离子。电子温度呈现出先快速上升、后缓慢下降的趋势，其峰值为 23.5eV。

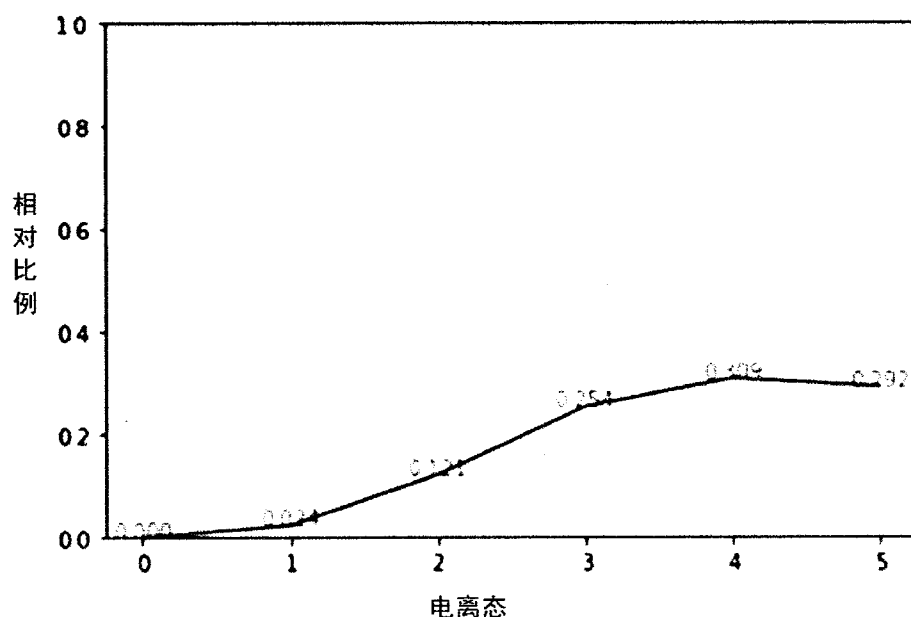


图 3-10 改造后 RCF 对 152mbar 气压下电离态分布模拟结果

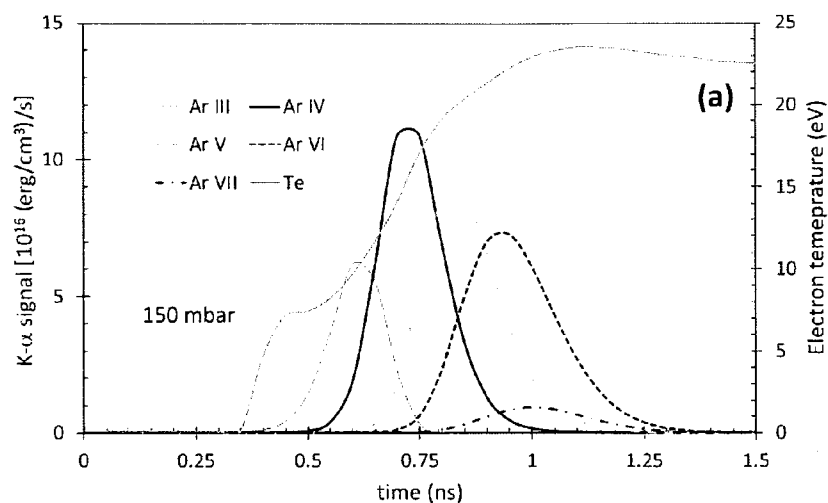


图 3-11 实验模型在 152mbar 气压下不同电离态 K α 线辐射强度与电子温度随时间变化的模拟结果^[26]

气压为 300mbar 情况下, 之前的工作^[26]只发表了其实验结果。我们在 2958eV-2962eV 范围内, 计算得到的谱线位置和强度与实验光谱大体相符, 如图(3-12)。2963eV 处的理论光谱峰值强度达到了实验谱线峰值数的 90%, 理论光谱在 2957eV 处的谱线虽然只有一个小峰, 但是峰值强度也达到了实验光谱的 68%。这里依旧出现了光谱高能端谱线强度不足的问题, 但在 2965eV~2975eV 范围内, 谱线峰值强度也都达到了实验光谱的 60%。

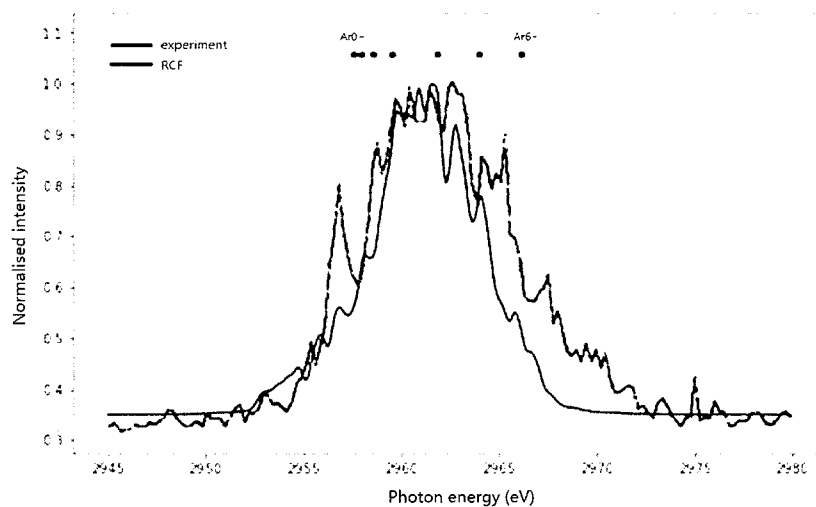


图 3-12 改造后 RCF 模拟 300mbar 气压下 Ar 的自发光谱。

我们的计算中采用的电子密度与实验诊断出电子密度 $3.6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 存在明显的差异。通过分析得知, RCF 是稳态模型, 在模拟 X 射线辐射源辐照 Ar 等离子体时, 由于辐射源辐射强度较大, 光致电离过程的速率系数会很大, 参考公式 (2-6), 为了保持稳态, 此时在模拟中加大电子密度, 虽然复合辐射的速率系数仅由电子温度确定, 但电子密度可以提高单位时间、单位体积发生复合辐射过程的次数, 如公式 (2-7)。进而人为的增强复合辐射过程, 用来平衡较强的光致电离过程, 使得等离子体能够处于碰撞-辐射平衡的稳态, 这样才能够用稳态模型来模拟这类激光等离子体。所以在模拟结果中, 电子密度这一项参数失去了诊断的参考价值。虽然电子密度这一项参数不符合实验给出的参数范围, 如表(3-3), 展示了模型得到的电子密度与实际气压进行比较。电子密度等于离子数目乘以平均电离度, 而气压与离子数目成正比, 但在实验中, 50mbar 气压下的氩气, 通过光致电离过程变成等离子体, 平均电离度为 1.28, 电子密度理应最低; 300mbar 气压下氩气变为等离子体, 平均电离度为 3.97, 电子密度理应最高。但稳态模型中代入的电子密度情况恰恰相反, 针对实验这样较稀薄的等离子体, 使用稳态模型模拟时代入了更高的电子密度; 并且等离子体越稀薄, 代入的电子密度越高。可以这样解释: 越稀薄的氩气, 为了达到稳态平衡, 在计算模拟中要代入越高的电子密度来增强光致电离过程的逆过程----复合辐射过程, 来人为的达到碰撞-辐射平衡, 因为越稀薄的氩气越会由于碰撞不充分导致偏离稳态较远。也可以推测, 当氩气越稠密, 越容易在实际实验中短暂的达到稳态, 电子密度一项参数也会越具有可信度。参考 RCF 模拟过非气体靶^[30], 如 Si、Fe 等固体靶, 模拟得到的电子密度参数是符合实验诊断结果的。

表 3-2 不同气压下平均电离度与代入电子密度比较

气压	50mbar	152mbar	300mbar
平均电离度	1.28	3.43	3.97
模拟代入电子密度	$3.90 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$	$1.90 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$	$6.31 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$

这里给出了稳态模型中,平均电离度随电子密度变化的趋势,如图(3-13),横坐标是电子密度的对数,纵坐标是平均电离度。当辐射源参数固定,电子温度为18eV时,调整不同的比例系数 α 为0.026(绿线)、2.6(黄线)、260(蓝线),用红色的点来表示改造后RCF模拟得到不同气压下平均电离度,蓝色的点表示实验中预估不同气压下平均电离度。可以从图中明显看出,稳态模型电子密度升高,平均电离度会下降。这是因为复合辐射过程发生的次数正比于电子密度(2-7),而光致电离过程发生的次数与电子密度无关(2-6);并且三体复合发生次数正比于电子密度的二次方(2-13),碰撞电离过程发生次数正比于电子密度(2-12),从稳态理论来解释,当电子密度趋于无穷大时,复合辐射与三体复合过程发生的次数远高于光致电离与碰撞电离过程,所以电离过程显得微乎其微,平均电离度趋于0。与之相反,当电子密度趋于0时,平均电离度会达到最大。

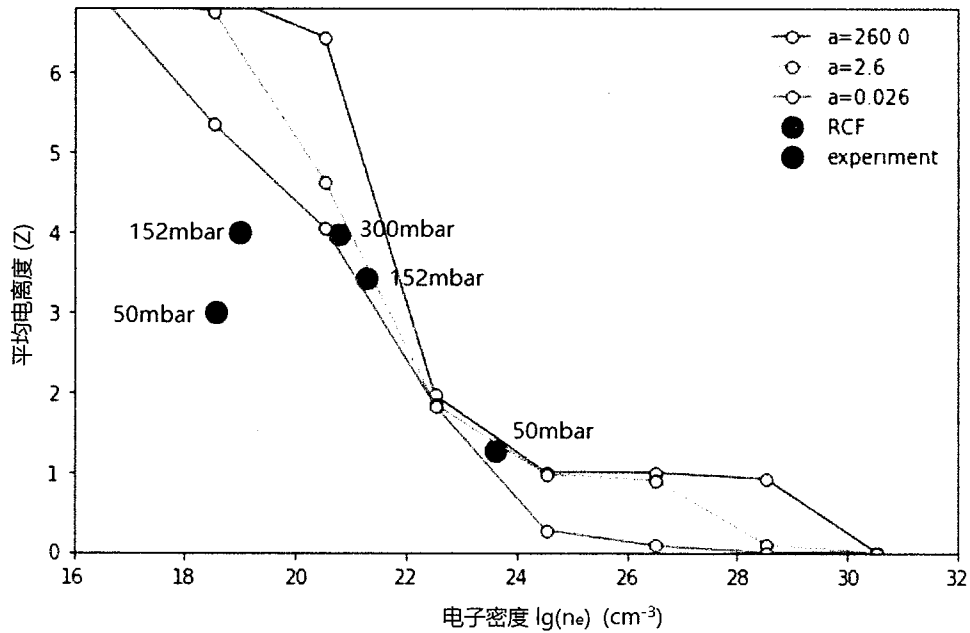


图 3-13 平均电离度在不同比例系数条件下, 随电子密度的变化趋势。

另外注意到模拟得到的平均电离度通常都比实验预估值要低,这与理论模拟光谱高能端谱线强度不足有关,也与过高的电子密度增强了复合辐射、三体复合、双电子俘获有关。而且实验数据随着气压增大平均电离度也相应增大,这说明实验中等离子体与稳态模型偏离较远。而我们使用稳态模型的意义就在于得

到高分辨率的光谱来认证一些谱线信息，并且通过光谱是可以得到比较可靠的平均电离度及电离态分布。

在谱线认证时发现了这类等离子体自发光谱的峰并非由单个强线展宽得到，一些强线的辐射强度对整个峰提供能量并不多，一个峰的主要由大量的弱线聚合而成。这是由于电离度较低，原子核外束缚电子数量较多，电子在不同能级上排列组合的种类繁多，这就导致了与电子跃迁相关的能级（如 $K\alpha$ 线， $2p \rightarrow 1s$ ）受到其他能级不同电子排布的影响，此时能级会相对于基态的能级发生偏移，能级间跃迁发出的光子也会在光谱上有一定程度的偏移。由于发生偏移的谱线数目巨大，最终产生的光谱会相当复杂，光谱中的峰都是许许多多不太强的谱线聚合到一起。

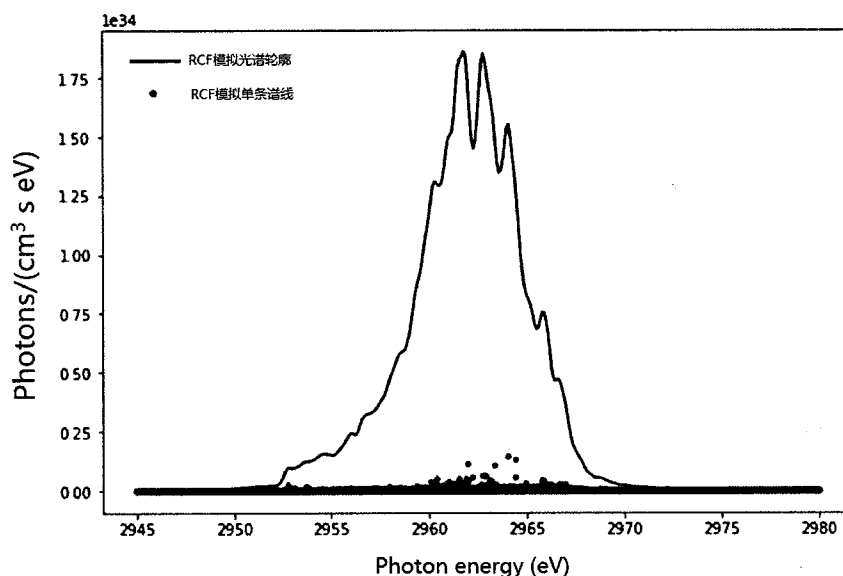


图 3-14 大量弱线聚集组成光谱。

图 (3-14) 将一次模拟中谱线展宽前的数据导出，用红色点代表单条谱线辐射强度。明显的发现，黑色光谱轮廓所出现的几个峰并非由少量强线展宽得到，而是由海量的弱线聚集而成，而且图中难以直观的将单条谱线与整体光谱的轮廓联系起来。找到这些弱线中最强的线，2964.02eV 处光子数量为 1.43×10^{33} ，而在光谱中 2964.02eV 处的峰值强度为 1.53×10^{34} ，贡献了不到 10%（没有考虑展宽效应，仅对比峰值强度）。为了说明低电离度等离子体谱线的聚集效应，我们将 2963eV~2965eV 范围内（半高全宽约为 1eV）所有谱线进行了统计，并以不同数量级的光子数进行分类，并统计了这些谱线对整个峰的贡献，如表 (3-3)。

表 3-3 统计不同量级光子数的谱线个数与能量占比

光子数量级	$>10^{33}$	$10^{32}\sim 10^{33}$	$10^{31}\sim 10^{32}$	$10^{30}\sim 10^{31}$	$10^{29}\sim 10^{30}$	$10^{25}\sim 10^{29}$
谱线个数	3	43	1582	4819	6373	7325
能量占比	~7.22%	~6.71%	~60.28%	~22.25%	~3.25%	0.28%

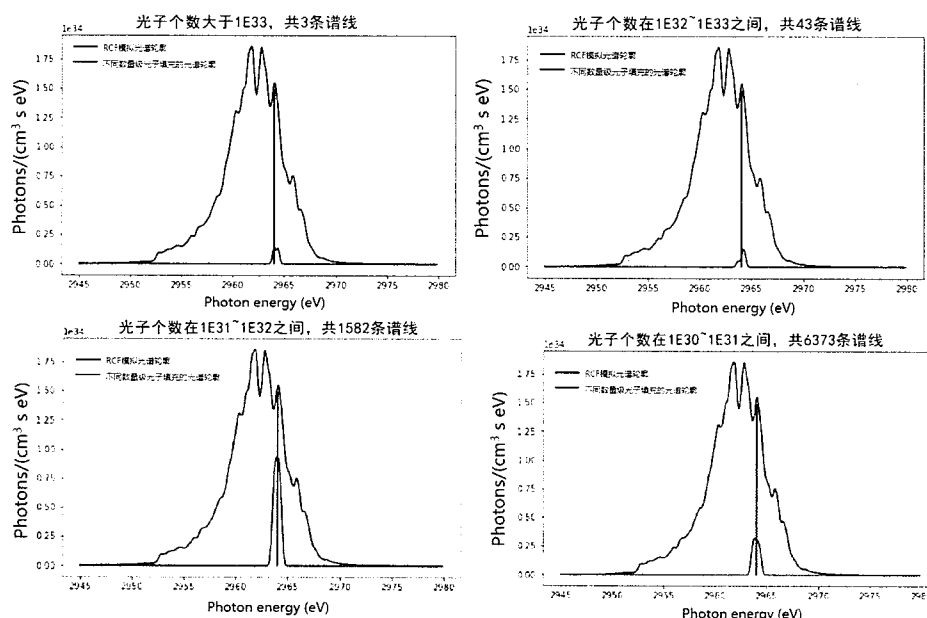


图 3-15 不同量级光子数对 2963eV~2965eV 整个峰的贡献

从表格中可以清楚的看到,所有谱线中,仅有三条谱线的光子个数超过 10^{33} ,但是这三条谱线对整个峰的能量贡献仅为 7.22% (考虑了展宽效应),如 (3-15) 左上角图,这三条弱线经过展宽后得到蓝色光谱。反而光子个数在 $10^{31}\sim 10^{32}$ 范围内共计 1582 条谱线对整个峰能量贡献达到了 60.28%,对应 (3-15) 左下角图。少量强线对整个峰的贡献微乎其微,只有大量的弱线聚集起来,才会将光谱的峰填满,以至于达到最佳的拟合效果。所以可得到结论:在模拟此类低电离度等离子体时,必须采用 DLA 精细程度的模型,考虑的量子态越多,才能充分的将光谱填满,使模拟结果越好。

通过以上分析,可以了解到这样复杂的等离子体光谱是由哪些量子态间跃迁的谱线组成的。由于最初组态选取时,内壳层组态只包含 $1s^22s^22p^5$ 和 $1s^12s^22p^6$

两种,所以在光谱集中在区间 2945eV~2980eV 范围内,所有模拟得到的谱线都是 $K\alpha$ 线。产生这样光谱的原子过程是这样的:强烈的 X 射线辐照到 Ar 等离子体上,由于辐射源光子能量高于 Ar 的 K 壳层电离能,直接将 1s 轨道上的一个电子通过光致电离过程变为自由电子,在 K 壳层上产生一个空穴,通过光致电离过程脱离原子核束缚的自由电子具有了动能,加热了等离子体,进而自由电子通过碰撞激发过程过程将外壳层电子激发,形成了复杂外壳层电子排布的离子。这是因为假设辐射源除了 3400eV~4400eV 区间内,其余波段辐射强度忽略不计,光之激发过程也相应的忽略不计(参考公式 2-3),所以说外壳层电子被激发主要由于自由电子的碰撞激发过程,而产生自由电子的渠道主要来自于光致电离过程,自电离过程与碰撞电离过程也通过数据得知具有一定的作用。这样的离子 2p 轨道上的电子向下跃迁,落到具有空穴的 1s 轨道上,发出了 $K\alpha$ 线;多条不同 $K\alpha$ 线由于聚集效应,最终形成了实验光谱。

3.2.5 尚有不足

使用改造的 RCF 对低电离度 Ar 的光致电离等离子体进行模拟,不足之处在于:(1)使用稳态模型模拟脉冲激光等离子体时,会出现激光等离子体偏离稳态较远的情况。(2)原子数据中包含高能激发态不足,导致模拟光谱高能端谱线缺失。(3)原子数据中量子态仍然需要继续测试并补充,来填补光谱部分峰的辐射强度。

为了得到更好的光谱模拟结果,并考虑到有限的计算能力无法一边保证谱线足够精细一边多加入一维时间参量,所以采用 DLA 精细程度的稳态模型。但使用稳态模型来模拟激光等离子体始终不够严谨,出现明显的弊端就在于上节所提到需要人为的提高电子密度这一自由参量,进而促使等离子体达到碰撞辐射平衡,才能得到拟合程度较好的理论光谱,否则直接将实验数据代入稳态模型中,得到的理论光谱与实验光谱相差极大。所以越稀疏的等离子体在计算中要提高电子密度的程度越大。图(3-4),图(3-5) Cloudy 的模拟结果也可以验证这一点,Cloudy^[35]也是一个稳态模型。将气压 50mbar 与 152mbar 对应的电子密度代入 Cloudy 中,就会得到图中展示出 50mbar 实验的电离度要高于 152mbar 实验的电离度这一错误结论。所以使用此类稳态模型模拟如此稀疏等离子体时,电子密度这一参数需要人为的调整,不可直接将诊断出的数据代入模型。反过来说,稳态模型诊断得到此类等离子体的电子密度是不可靠的。

另外进行光谱模拟时，一直会出现高能端拟合不佳的情况。这是因为挑选量子态的工作不是很完善，由于计算能力有限，目前只考虑了 ArI~ArVII 的 7 个电离态，并且只考虑了基态，价电子最高跃迁到 7p 能级的单激发态和价电子最高跃迁到 4p 能级的双激发态。更高能量的激发态并没有加入到计算当中，这可能是导致光谱高能端拟合不佳的原因。

另外光谱的低能端，虽然轮廓符合较好，模拟光谱中绝大多数峰的位置也都与实验光谱中峰的位置吻合，但是会出现光强不足的情况，拟合最差的峰的强度也填充了 68%。目前这部分原因并未找到，但考虑到上节提到的聚集效应，可能继续增加量子态能够更好的增加这些谱线的辐射强度。

3.3 小结

本章介绍了使用改造后的 RCF 模型对 Vulcan 拍瓦激光器上的一次光致电离等离子体实验进行了模拟。总的来讲，光谱模拟结果有了很大的提升，无论是光谱的轮廓、峰的位置和强度，都与实验光谱符合较好，诊断出了等离子体的电子温度、电离态分布，描述了实验中等离子体的状态，得到了相关原子过程的速率系数、离子态布居，对低电离度空穴离子产生 $K\alpha$ 线的过程进行了分析。模拟结果肯定了 DLA 精细程度的模型对低电离度等离子体的模拟是必不可少的，合理的进行组态选取也是成功模拟光谱的必要条件之一。并且了解了低电离态等离子体光谱的形成是由于大量弱线的聚集效应而非少量强线的展宽效应。

第四章 结论与展望

本文从理论方面对低电离度光致电离等离子体的自发光谱进行了模拟研究。研究的重点在于改造 RCF 模型,使其适用范围更广,能够适应多种谱形的辐射源、多量子态的算例,并能够快速计算速率平衡方程。另外使用改造后的 RCF 模型成功的模拟了低电离度光致电离等离子体的自发光谱,得到较好的模拟结果。并从模拟结果结合模型,讨论了改造后模型对模拟低电离度光致电离等离子体的优点与不足。

改造 RCF 模型方面,包括(1)外加辐射源的输入部分:原来只能输入黑体辐射场,由辐射温度和稀释因子来确定。修改后,除了黑体辐射,还可以输入幂律分布或任意按频率分布的辐射场。(2)增加可处理的量子态数目:修改其代码框架结构和存储数据的方式,将计算可容纳量子态的数目提升了 5 倍,更好的适应低电离度等离子体电子排布种类繁多、量子态数目巨大的情况。(3)优化算法,提高计算效率:改进了计算速率平衡矩阵的数学方法,将原来用时 1h3min 的算例缩短至 28s。

总的来讲,对 RCF 的改造并没有涉及其平衡条件与模型精细程度,改造后的 RCF 仍然是基于辐射-碰撞平衡模型、基于 DLA 精细程度的光致电离等离子体处于非局域热动平衡的稳态模型;做出的改造是对辐射源、计算框架、存储数据的方式和计算的数学方法进行优化。改造后的效果为:能够快速计算在任何辐射条件下包含数万量子态的等离子体的模型,可适用于处于天体或实验室中低电离度的光致电离等离子体的光谱计算。

本文用改造后的 RCF 模拟了 2016 年 Vulcan 拍瓦激光装置上进行的实验^[28]。该模型得到了比 plasma model 和 Cloudy 两种模型拟合程度更高的气压在 50mbar 和 152mbar 的自发光谱;并且给出了上述两种模型没有拟合成功的气压 300mbar 的自发光谱。通过模型诊断出的数据,可以判断出实验中 Ar 等离子体内壳层电子排布主要受辐射场的影响,即光致电离过程占主导,在相同的辐射源条件下调整大范围的气压,内壳层电子始终保持在 K 壳层上存在一个空穴,不会出现 KK 空穴,所以本文认为单 K 空穴仅与辐射场有关,而与气压或者是说电子密度影响的碰撞电离过程无关。这项结论与 LCLS 激光装置上进行的 Al 的空穴等离子体实验^[21]结果相同:电子碰撞过程无法使 K 壳层空穴产生。本文研究的实验中,

电子碰撞过程仅使得外壳层价电子发生了大量的激发和少量的电离，碰撞过程能够影响到最内层的能级为 3s 能级，碰撞过程对 L 壳层的电子影响几乎不存在。

在谱线认证时，本文发现了低电离度等离子体模拟时所需要关注的聚集效应：光谱中单个峰并非由少量强线展宽得到的，而是通过大量能量相近的谱线聚集得到的。其原因就在于，当等离子体内壳层结构相同时，相同电离态的离子会发出能量相近的光子；之所以能量“相近”而非“相同”，是因为外壳层电子排布方式不同会使内壳层电子跃迁时产生光子能量不同，最终在光谱上产生距离极近的密密麻麻的弱线线丛，大量的弱线聚合组成一个峰。当考虑量子态数目不够多时，是无法得到拟合程度较好的光谱，所以从理论上讲，成功模拟出实验光谱的重要原因就在于加入了足够多的量子态。并且预计，合理的加入更高的激发态和电离态，会使理论光谱拟合程度更好

纵观 RCF 所模拟过的实验，这是首次模拟短脉冲激光器上进行的实验，也是首次模拟稀薄气体靶的实验，更是首次利用线谱作为辐射源，所以难以与其他实验结果相对照。虽然光谱模拟结果较好，但是出现了电子密度参数无法符合实验模拟诊断结果的现象。上文给出了代入电子密度偏高的解释，但仍然需要通过实验来确认提出的解释是否合理。这里给出一些后续实验的建议：将稀薄的气体靶换成固体靶，继续使用短脉冲激光与用来产生线谱辐射源的靶相互作用，产生能量大过固体靶材料 K 壳层电离能的光子作为辐射源，进行一次实验。这样做是因为考虑到在 Vulcan 激光装置上进行的实验不断填充 Ar 气，Ar 气的密度越高，Ar 等离子体的电子密度也越高，等离子体的平均电离度越高，这是有悖于稳态平衡假设的。从稳态假设来讲，处于稳态的等离子体电子密度越高，会抑制电离过程，等离子体的平均电离度会随之下降；实验结论与稳态平衡模型相悖，主要归因于实际实验偏离稳态假设太远。跟据 RCF 以往模拟固体靶的经验^[29-30]，是可以在脉冲激光实验条件下，用稳态模型得到较好的模拟结果。所以需要设计一个线谱辐射源，但等离子体电子密度较高的，容易达到稳态的实验来验证我们的猜想。这样的实验设计由于辐射源采用窄波段的高能线谱，辐射源与靶相互作用可以产生低电离态等离子体，并结合以往可用稳态模型诊断固体靶较高电子密度的例子，得到实验光谱并用稳态模型模拟，来判断高电子密度假设的合理性。

上文提过，在有限的计算条件下，稳态模型能得到更精细的模拟结果，含时模型更能准确契合激光实验。目前稳态假设对于激光等离子体来说始终没有足够的信服力，但在实际使用稳态模型诊断激光等离子体时，大部分结果还是较为

准确的。所以在理论研究方面，迫切需要提出一项判据，来判断哪些激光等离子体偏离稳态假设程度较近，可直接使用稳态模型来研究实验；判断哪些激光等离子体偏离稳态假设程度较远，用稳态模型模拟激光等离子体时哪些物理量时可信的。假设有了这样的判据，比起在大型计算设备上使用高精度原子数据、包含多量子态的含时模型的数值模拟，更具有灵活性并且能够大大的节省计算资源。

在今后地工作中，我们希望通过构建更完善地光致电离等离子体模型，来解释天体环境中与实验室光致电离等离子体效应，进而探索神奇的天体现象。