

专题: 原子分子和材料物性数据

低密度铝铁金等离子体辐射不透明度数据库*

曾交龙^{1)3)†} 高城³⁾ 袁建民^{2)‡}

1) (浙江工业大学物理学院, 杭州 310023)

2) (吉林大学原子分子物理研究所, 长春 130012)

3) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

(2025 年 3 月 8 日收到; 2025 年 4 月 27 日收到修改稿)

等离子体不透明度在辐射输运和辐射流体力学研究中具有重要的应用, 在实际应用中, 这些参数主要依赖于理论研究获得, 实验提供了对理论计算精度的检验. 在细致能级模型的理论框架下, 对铝、铁和金等离子体的辐射不透明度进行了系统的理论研究, 建立了在密度 $0.001\text{--}0.1\text{ g/cm}^3$ 和温度 $1\text{--}300\text{ eV}$ 范围内光谱分辨的辐射不透明度和 Rosseland 和 Planck 平均不透明度数据库. 不透明度的理论研究涉及到特定等离子体条件下的大量量子态, 在复杂的金等离子体条件下, 量子态的数目可能以亿计, 甚至达到万亿乃至更大, 因而其精确的研究显然具有很大的挑战性. 对于高 Z 的金等离子体, 公开发表的不透明度数据非常少, 本工作提供的数据库为高 Z 不透明度研究提供了参考. 对中低 Z 的铝和铁等离子体, 本课题组以前公开发表的工作很好地解释了实验结果, 表明了理论方法的可靠性. 本文与国际上 ATOMIC 程序得到的理论结果进行比较, 分析两种方法得到结果的异同, 大部分等离子体条件下, 两者符合较好, 对于有差异的部分, 指出了差异的物理根源. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.22232> 中访问获取.

关键词: 不透明度, 铝铁金等离子体, 组态相互作用, 细致能级模型

PACS: 52.25.Os, 31.15.am, 32.30.-r, 31.15.A-

DOI: 10.7498/aps.74.20250301

CSTR: 32037.14.aps.74.20250301

1 引言

等离子体不透明度描述辐射在物质中的吸收特性, 不透明度直接进入辐射输运方程从而成为支配辐射输运过程的基本物理量, 因此是惯性约束聚变和辐射输运研究中必不可少的基本参数. 随着研究的不断深入, 辐射输运的物理建模越来越强烈地依赖于不透明度的计算精度, 特别在天体物理的相关问题研究中, 不透明度的 1% 的误差可能导致结果定量乃至定性上的差异. 同时, 不透明度也是研究等离子体特性的重要途径, 光谱分辨的不透明度与辐射流体力学结合, 可以得到等离子体系统的温

度、密度分布、平均电离度随时间的变化、电离态分布, 乃至系统的平衡与非平衡信息等.

铝、铁、金等离子体的辐射不透明度在惯性约束聚变研究中起着重要的作用^[1]. 在这 3 种材料中, 对中低 Z 的铝和铁等离子体, 不管是实验还是理论研究, 都比高 Z 的金等离子体研究得多. 当然这里还有一个因素, 就是金等离子体的辐射不透明度, 由于其在惯性约束聚变研究中的重要性和特殊性, 有可能有相当一部分实验或者理论研究结果没有发表. 对铝等离子体, 早在 20 世纪 80 年代末就具备了实验定量测量不透明度的能力^[2,3], Davidson 等^[2]测量了等离子体温度为 40 eV 、密度为 0.0135 g/cm^3 的铝等离子体不透明度, 不久之后,

* 国家自然科学基金 (批准号: 12174343, 12274384, 12335015) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jlzeng@zjut.edu.cn‡ 通信作者. E-mail: yuanjianmin@jlu.edu.cn

Perry 等^[3] 测量了温度为 58 eV、密度为 0.02 g/cm³ 的铝等离子体不透明度. 最近, Qiang 等^[4] 在中国 8MA 的 Z-pinch 装置上研究了铝等离子体的电离动力学和不透明度. 实验和理论研究^[4-9] 的不断深入使得对低 Z 的铝等离子体的辐射不透明度研究获得了很高的精度, 足以满足使用铝作为示踪元素诊断实验等离子体的温度、密度等信息, 为等离子体不透明度实验研究提供帮助.

对中 Z 铁等离子体, 1996 年, Winhart 等^[10] 实验测量了温度 22 eV、密度 0.01 g/cm³ 下, 在光子能量范围 70—140 eV 的不透明度, 1992 年, Springer 等^[11] 测量了温度 59 eV、密度 0.0113 g/cm³ 下, 在光子能量范围 80—100 eV 的光谱分辨的以及 Rosseland 和 Planck 群平均不透明度. 使用 Z-pinch 装置, Bailey 等^[12] 测量了温度 156 eV、电子数密度 6.9×10^{21} cm⁻³ 的铁等离子体在光子能量范围 800—1800 eV 的不透明度. Zhang 等^[13] 实验测量了铁等离子体温度为 72 eV 时, 在光子能量范围 150—1200 eV 的不透明度. 对这些等离子体密度在 0.01 g/cm³ 附近的不透明度研究, 使用细致能级模型的理论结果^[14-17] 与实验测量吻合很好, 表明了学界对中 Z 等离子体辐射不透明度精密研究的能力, 甚至使用细致能级模型可以用于等离子体状态的诊断^[14-16]. 然而, 随着等离子体密度的增大, 理论与实验之间出现了比较大的差异^[18,19], 促使研究人员思考在稠密等离子体中的新颖物理效应.

在间接驱动的惯性约束聚变研究中, 一个主要机制是驱动内爆获得高的内爆速度, 这要把装有燃料的球型靶丸放在强 X-射线辐射中, 靶丸烧蚀层吸收 X-射线能量, 通过内爆压缩产生高压 (Mbar 数量级), 使 DT 燃料达到高温高密度状态, 实现聚变点火燃烧. 通常产生 X-射线辐射的材料为高温金等离子体, 精确确定金等离子体的不透明度是实现聚变点火的关键因素之一. 虽然金等离子体的不透明度在惯性约束聚变研究中非常重要, 但是公开发表的实验^[20-22] 和理论^[23-27] 结果有限, 这给研究精度的评估增添了一定的难度. 不过, 即使对于高 Z 的金等离子体, 使用细致能级模型得到的理论不透明度也与实验测量吻合较好^[24], 显示了目前对高 Z 等离子体不透明度研究的能力.

从上述不透明度研究的进展可以看出, 实验和理论的相互促进对这个领域的发展及其重要, 但是, 实验往往只能在有限的等离子体条件下, 对有

限的光子能量范围的不透明度进行测量, 而在实际应用中, 往往需要覆盖等离子体的宽广温度密度范围以及全光子能量范围的不透明度数据, 这一般只能依靠理论来解决这个问题. 能够满足实际应用的不透明度数据库, 需要更进一步的发展. 本文试图利用目前先进的理论工具, 即细致能级模型的方法, 建立铝、铁、金等离子体在密度为 10^{-3} — 10^{-1} g/cm³ 和温度 1—300 eV 范围内的不透明度数据库, 一方面满足应用的需求, 另一方面为其他近似理论方法提供参考.

2 理论方法

2.1 不透明度

本文使用细致能级物理模型计算等离子体的不透明度^[28-30]. 对能量为 $h\nu$ 的光子, 等离子体对辐射的吸收是下列基本吸收过程之和, 即束缚-束缚、束缚-自由、自由-自由和散射过程. 束缚-束缚过程引起的吸收系数为

$$\mu_{bb}(h\nu) = \sum_i \left[\sum_{tt'} N_{it} \sigma_{itt'}(h\nu) \right], \quad (1)$$

式中, N_{it} 为 i 度电离的离子第 t 个能级的电子数密度; $\sigma_{itt'}(h\nu)$ 是电离度为 i 的离子从能级 t 到 t' 的光激发截面, 其可由吸收振子强度 $f_{tt'}$ 得到

$$\sigma_{itt'}(h\nu) = \frac{\pi e^2}{mc} f_{tt'} S(h\nu). \quad (2)$$

这里 e 和 m 分别为电子的电荷和静止质量; $S(h\nu)$ 为光谱线型, 若考虑电子碰撞展宽和自电离展宽, 则线型为 Lorentz 线型, 若只考虑 Doppler 展宽, 则为高斯线型, 本文使用的谱线轮廓是这两种线型的卷积, 即 Voigt 线型:

$$S(h\nu) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} \Gamma_d} H(a, \nu), \quad (3)$$

式中 $H(a, \nu)$ 为 Voigt 函数:

$$H(a, \nu) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2}}{a^2 + (\nu - x)^2} dx, \quad (4a)$$

$$a = \sqrt{\ln 2} \Gamma_l / \Gamma_d, \quad (4b)$$

$$\nu = \sqrt{\ln 2} (h\nu - h\nu_0) / \Gamma_d, \quad (4c)$$

其中, Γ_d 和 Γ_l 分别为高斯线型和 Lorentz 线型的半高全宽, 可以使用量子力学方法或者半经典方法计算得到^[31].

束缚-自由吸收可由每个离子的光电离截面的统计求和得到:

$$\mu_{\text{bf}}(h\nu) = \sum_i N_i \sigma_{\text{ibf}}(h\nu), \quad (5)$$

式中, N_i 和 $\sigma_{\text{ibf}}(h\nu)$ 分别为 i 度电离的离子密度和光电离截面, $\sigma_{\text{ibf}}(h\nu)$ 可通过对离子 (考虑了电离能下降以后的束缚态能级的光电离截面) 统计求和得到:

$$\sigma_{\text{ibf}}(h\nu) = \sum_t \frac{g_{it} e^{-E_{it}/kT}}{Z_i} \sigma_{it}(h\nu), \quad (6)$$

其中 E_{it} 是 i 电离度离子第 t 个能级相对于基态的能量, k 为玻尔兹曼常数, T 为等离子体的温度, $\sigma_{it}(h\nu)$ 为 i 离子的第 t 个能级的光电离截面. 连续-连续吸收的不透明度贡献使用 Kramers 截面得到:

$$\sigma_{\text{iff}}(h\nu) = \frac{16\pi^2 e^2 h^2}{3\sqrt{3}c(2\pi m)^{3/2}} \frac{Z_i^3 N_e g_{\text{iff}}}{(kT)^{1/2} (h\nu)^3}, \quad (7)$$

其中, N_e 为等离子体中的自由电子数密度, Z_i 为离子电荷, g_{iff} 称为自由-自由 Gaunt 因子. 散射吸收系数通过 Thompson 散射截面公式获得.

这样, 对能量为 $h\nu$ 的光子, 总的辐射不透明度为

$$\rho\kappa'(h\nu) = [\mu_{\text{bb}}(h\nu) + \mu_{\text{bf}}(h\nu) + \mu_{\text{ff}}(h\nu)] \times \left(1 - e^{-h\nu/kT}\right) + \mu_{\text{scatt}}(h\nu), \quad (8)$$

不透明度上的一撇表示在计算中已考虑受激发射. 这里 $\mu_{\text{ff}}(h\nu)$ 和 $\mu_{\text{scatt}}(h\nu)$ 分别表示自由-自由跃迁 (free-free transition) 和散射过程 (scattering process) 贡献的吸收系数.

Rosseland 和 Planck 平均不透明度定义为

$$\frac{1}{K_R} = \int_0^\infty \frac{W_R(u) du}{k'(u)}, \quad (9)$$

$$K_P = \int_0^\infty [k'(u) - k_{\text{scatt}}(u)] W_P(u) du, \quad (10)$$

其中 $k'(u)$ 和 $k_{\text{scatt}}(u)$ 分别表示考虑了受激发射的总辐射不透明度和散射过程贡献的不透明度, 约化光子能量定义为 $u = h\nu/kT$, Rosseland 和 Planck 权重函数分别为

$$W_R(u) = \frac{15}{4\pi^4} \frac{u^4 \exp(-u)}{[1 - \exp(-u)]^2}, \quad (11)$$

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

Rosseland 和 Planck 权重函数分别在 $u \approx 3.8$ 和 $u \approx 2.8$ 取极大值, 离开极大值位置处, Rosseland 和 Planck 权重函数越来越小.

2.2 等离子体电离平衡

从上述不透明度的定义可以看出, 不透明度的计算需要等离子体中所有可能的量子态的粒子分布数目, 这要求解等离子体的电离平衡方程. 等离子体的电离平衡, 考虑由自洽场方法得到的等离子体屏蔽势计算得到的电离能下降. 在计算自由电子的配分函数时, 利用整个等离子体物理系统的自由能最小原理, 得到等离子体的电离平衡方程:

$$\frac{N_{i+1}}{N_i} = \frac{Z_{i+1}}{Z_i} \frac{8\pi}{h^3} \frac{1}{N_e} e^{-\varphi_i/kT}, \quad (13)$$

(13) 式表达了 $i+1$ 电离度离子与 i 电离度离子的粒子数目之比取决于配分函数与电离势和温度之间的关系. 对于热平衡的等离子体, 一旦不同电荷态粒子的相对分布确定, 那么根据玻尔兹曼统计, 不同量子态上的粒子数目即可得到. 这里 φ_i 表示 i 电离度离子的电离能.

2.3 原子参数

等离子体不透明度的计算需要大量的基本原子参数, 这些原子参数包括: 原子能级、束缚能级之间的辐射跃迁速率、束缚能级的光电离截面以及连续态之间的吸收截面等. 目前的主流物理模型在处理原子结构特性时, 一般基于自由原子假设, 这在等离子体的密度较小, 环境对离子的屏蔽作用不重要时是适用的. 具体的计算细节参看前面引用的理论文献 [28,29]. 但是在稠密等离子体环境中, 等离子体对其中离子的屏蔽作用很强, 对原子结构有很大的影响, 从而影响辐射不透明度, 因而需要考虑更多的物理效应.

3 结果与数据评估

目前国际上主要的不透明度计算程序见参考文献 [32-37]. 限于篇幅, 这里不展开论述. 这些程序有相当一部分针对天体混合物等离子体, 因而难于进行比较, ATOMIC^[37] 针对低 Z 等离子体, 计算了光谱分辨的不透明度, 在学界被认为计算精度较高, 本文主要与这一程序的计算结果进行比较. 但是, 金等离子体的数据非常缺乏, 难以找到数据

进行系统的检验和评估.

3.1 铝等离子体

首先对铝等离子体, 给出几个示例性的结果, 并与 ATOMIC 计算软件^[37]的结果进行比较. 不透明度理论研究经过多年的发展, 美国核武器试验室开发的 ATOMIC 计算软件采用了细致能级模型的计算方案, 被认为是国际上计算精度最高的程序之一. 相比于其他的程序, 可以明显地发现, 其计算的细节更接近反映等离子体中真实的物理.

图 1 比较了本文计算的铝等离子体不透明度与 ATOMIC 软件的计算结果, 铝等离子体的密度为 0.1 g/cm^3 , 温度为 100 eV , 实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件的结果. 由图 1 可见, 铝等离子体的吸收主要体现在两个谱线吸收占主导地位的光子能量区域, 以及介于这两个谱线吸收之间的连续吸收区域, 光子能量小于 300 eV 的谱线吸收来自于束缚态从主量子数 $n = 2$ 及其以上的束缚-束缚跃迁, 而光子能量在 $1500\text{--}2100 \text{ eV}$ 之间的谱线来自于束缚态从主量子数 $n = 1$ 的束缚-束缚跃迁. 两个连续不透明度主导的光子能量区域, 一个光子能量范围大约是 $400\text{--}1400 \text{ eV}$, 主要是由 L 壳层的电子电离贡献的, 另一个光子能量大于 2100 eV 的连续不透明度, 是由 K 壳层电子的光电离过程贡献.

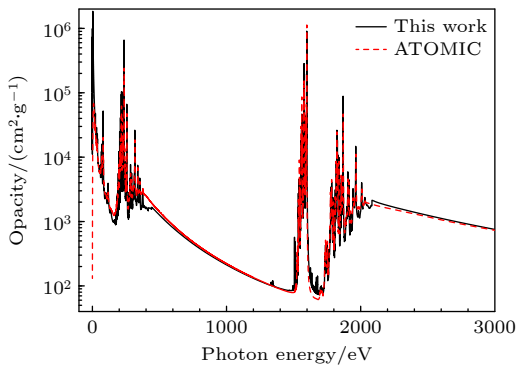


图 1 密度为 0.1 g/cm^3 、温度为 100 eV 的 Al 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件得到的结果
Fig. 1. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Al plasma at a density of 0.1 g/cm^3 and a temperature of 100 eV .

由图 1 可以看出, 在给出的光子能量内, 本文结果与 ATOMIC 软件两者符合较好, 对于没有谱线吸收的光子能量区域, 两者的计算结果具有很好

的一致性. 对于谱线吸收主导的光子能量区域, 也吻合较好. 对于 $1s\text{-}np$ 的跃迁谱线, 特别是 $1s\text{-}2p$ 谱线, 谱线强度与线形具有很好的一致性. 在极低光子能量区域, 两者结果存在差异. 不过, 这些低光子能量区域差异对 Rosseland 和 Planck 平均不透明度影响很小, 这是因为对于温度为 100 eV 的等离子体, Rosseland 和 Planck 权重函数分别在 380 eV 和 280 eV 光子能量处取得极大值, 光子能量离得越远, 权重函数越小, 从而对 Rosseland 和 Planck 平均不透明度的贡献也越小.

图 2 所示为本文计算的密度为 0.1 g/cm^3 , 温度为 10 eV 铝等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算结果的比较. 在给出的光子能量内, 本文结果与 ATOMIC 软件符合较好. 对于没有谱线吸收的光子能量区域, 两者的计算结果具有很好的一致性, 但是, 对于谱线吸收主导的光子能量区域, 与图 1 的差异相比略大. 对于 $1s\text{-}2p$ 谱线吸收, ATOMIC 计算缺失了位于光子能量约为 1700 eV 位置处的强吸收. 虽然对于温度为 10 eV 的铝等离子体, 位于这个位置的强吸收对于计算 Rosseland 和 Planck 平均不透明度的影响不大, 但是本文计算还是很好地展示了这些吸收结构, 这有利于全面理解等离子体对辐射的吸收.

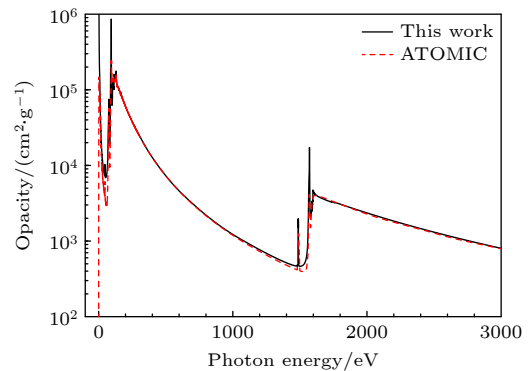


图 2 密度为 0.1 g/cm^3 、温度为 10 eV 的 Al 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件得到的结果
Fig. 2. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Al plasma at a density of 0.1 g/cm^3 and a temperature of 10 eV .

图 3 所示为本文计算的铝等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算结果的比较, 铝等离子体的密度为 0.001 g/cm^3 , 温度为 100 eV . 可以看出基本上可得到与图 1 一致的结论, 本文计算结果与 ATOMIC 软件具有合理的一致性.

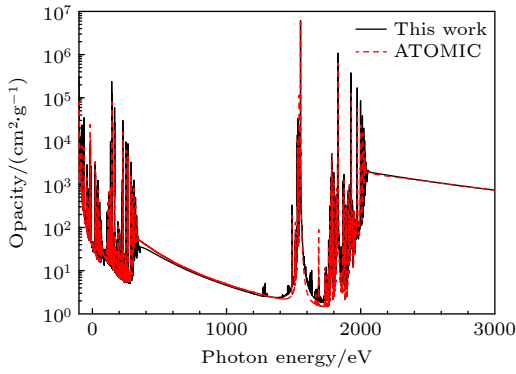


图 3 密度为 0.001 g/cm^3 、温度为 100 eV 的 Al 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件得到的结果
Fig. 3. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Al plasma at a density of 0.001 g/cm^3 and a temperature of 100 eV .

图 4 所示为本文计算的铝等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算结果的比较, 铝等离子体的密度为 0.001 g/cm^3 , 温度为 10 eV . 与图 3 一样, 本工作计算得到的连续不透明度与 ATOMIC 软件的结果符合非常好, 但是, 对于谱线吸收主导的光子能量区域, 两者结果存在一定差异, 主要是 ATOMIC 计算中缺失了部分高能端的 $1s\text{-}np$ 谱线吸收. 对于温度为 10 eV 的铝等离子体, 这些强的谱线吸收对于计算 Rosseland 和 Planck 平均不透明度影响不大, 因而 ATOMIC 计算中可能没有包括, 但是本文计算结果还是很好地展示了这些吸收结构. 这对于辐射运输的研究是不可缺少的.

表 1 列出了铝等离子体在密度为 $0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1 \text{ g/cm}^3$ 和温度为 $2, 5, 10, 20, 50, 100, 150, 200, 250, 300 \text{ eV}$ 条件下的 Rosseland

和 Planck 平均不透明度. 可以看出: 在给定的温度下, Rosseland 和 Planck 平均不透明度都随密度增大而增大; 在给定的密度下, Rosseland 和 Planck 平均不透明度一般随温度增大而减小, 但是在局部温度区域有时会违反这一规律 (如在 10 eV 和 20 eV 温度时).

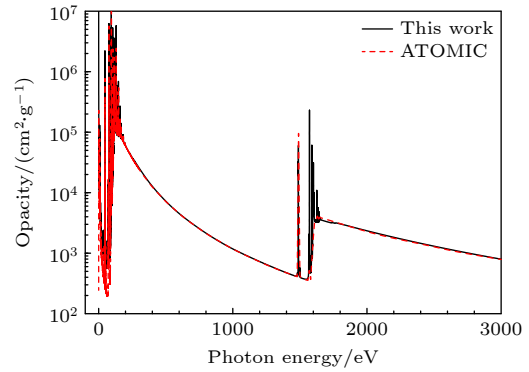


图 4 密度为 0.001 g/cm^3 、温度为 10 eV 的 Al 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件的结果
Fig. 4. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Al plasma at a density of 0.001 g/cm^3 and a temperature of 10 eV .

3.2 铁等离子体

图 5 所示为本工作计算的铁等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果的比较, 铁等离子体的密度为 0.1 g/cm^3 , 温度为 100 eV , 实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件得到的结果. 由图 5 可见, 铁等离子体的吸收主要体现在 3 个谱线吸收区域以及介于之间的连续吸收区域, 光子能量小于 500 eV 的谱线吸收来自于主量子

表 1 铝等离子体在不同密度和不同温度 T 条件下的 Rosseland 和 Planck 平均不透明度 (cm^2/g)
Table 1. Rosseland and Planck mean opacities (cm^2/g) of Al plasmas at different densities and different temperatures.

T/eV	0.001 g/cm^3		0.005 g/cm^3		0.01 g/cm^3		0.05 g/cm^3		0.1 g/cm^3	
	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck
2	74333	500110	87959	474839	110647	474197	177509	402629	180822	359046
5	7551	44620	8766	68329	11913	80658	25790	113542	30749	118019
10	1042	12392	2314	14992	3704.4	17395	9399.6	28422	13504	36801
20	1246	28704	3385	40416	5206.4	45251	14575	56812	22679	62396
50	405.4	5686.7	1711	10153	2826.8	12598	7321.4	18380	9899.5	20553
100	13.35	102.87	70.71	430.02	141.81	748.41	575.15	2409.4	875.08	3486.0
150	1.856	66.030	7.442	102.91	17.045	142.69	75.255	399.56	136.60	626.05
200	1.011	113.10	2.888	208.52	7.2548	254.77	32.294	366.71	68.368	447.57
250	0.632	49.966	1.903	161.38	4.4554	239.37	22.087	461.37	51.632	571.70
300	0.446	15.575	1.180	68.428	2.7127	123.48	15.009	353.16	38.217	499.53

数 $n = 3$ 及其以上的束缚态引起的束缚-束缚跃迁, 光子能量在 700—1400 eV 之间的谱线来自于束缚态主量子数 $n = 2$ 的束缚-束缚跃迁, 而光子能量在 6400—7800 eV 的谱线来自于束缚态主量子数 $n = 1$ 的束缚-束缚跃迁. 与图 1 相比, 铁比铝等离子体展现了更为丰富的吸收结构.

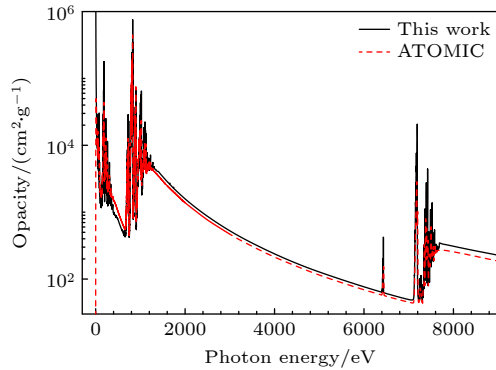


图 5 密度为 0.1 g/cm³、温度为 100 eV 的 Fe 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件得到的结果
Fig. 5. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Fe plasma at a density of 0.1 g/cm³ and a temperature of 100 eV.

为了更清楚地展示谱线的吸收结构, 图 5 在光子能量 0—1500 eV 区域的不透明度放大图如图 6 所示. 从图 6 可以看出, 本工作位于光子能量在 700—900 eV 区域的吸收结构与 ATOMIC 的计算结果符合很好, 这个区域对 Rosseland 和 Planck 平均不透明度贡献最大. 与铝等离子体相比 (见图 1—图 4), 铁等离子体的连续不透明度主导的区域 (光子能量范围 500—700 eV, 1400—6800 eV), 本工作与 ATOMIC 的计算结果差异略大, 这应该是两者对电离平衡的描述略有不同引起. 对于铝等离子体, 由于最多只有 13 价离子, 而铁有 26 价离子, 越多的离子价态越有可能在电离平衡上反映出来差异.

图 7 所示为本文计算的铁等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 铁等离子体的密度为 0.1 g/cm³, 温度为 10 eV. 光子能量的范围从较小值增大到 9000 eV, 包括了从价壳层到 K 壳层所有可能的跃迁. 可以看出, 本工作的计算结果与 ATOMIC 软件在光子能量小于 5000 eV 范围内符合比较好, 对于 10 eV 这样的低温等离子体, 这一能量区域对 Rosseland 和 Planck 平均不透明度起主导贡献. 然而, 在光子能量大于 7000 eV 的

区域, ATOMIC 计算得到的连续不透明度明显比本工作得到的大. 同时, 较高能量的谱线吸收在 ATOMIC 的计算中也有缺失, 虽然这部分对 Rosseland 和 Planck 平均不透明度几乎没有什么贡献.

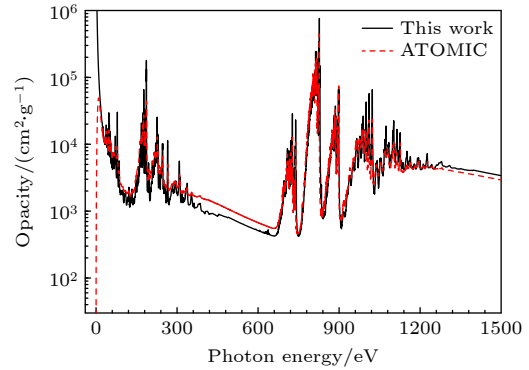


图 6 图 5 在光子能量 0—1500 eV 范围内的放大, 密度为 0.1 g/cm³、温度为 100 eV 的 Fe 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较. 这个光子能量范围决定了 Rosseland 和 Planck 平均不透明度

Fig. 6. Comparison of opacity in photon energy range of 0–1500 eV obtained by present work and ATOMIC code for Fe plasma at a density of 0.1 g/cm³ and a temperature of 100 eV. The Rosseland and Planck mean opacities are largely contributed by this photon energy range.

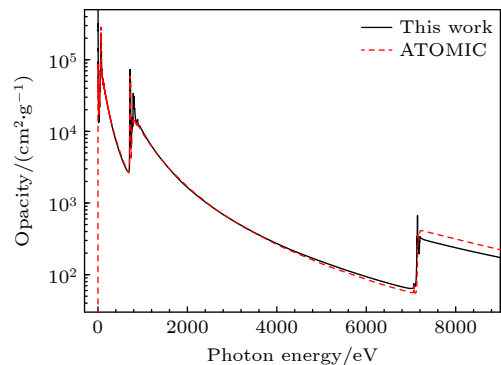


图 7 密度为 0.1 g/cm³、温度为 10 eV 的 Fe 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件的结果
Fig. 7. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Fe plasma at a density of 0.1 g/cm³ and a temperature of 10 eV.

图 8 所示为本工作计算的铁等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果的比较, 铁等离子体的密度为 0.001 g/cm³, 温度为 100 eV. 对这种稀薄的等离子体, 可以看出, 与图 5 (密度 0.1 g/cm³, 温度为 100 eV) 不一样的地方, 本文计算结果与 ATOMIC 软件在连续吸收主导的光子能量区域, 两者符合很好, 但是, 对于谱线吸收主导的光子

能量区域, 谱线强度有一定的差异, 特别是对于 $1s\text{-}np$ 谱线吸收区域.

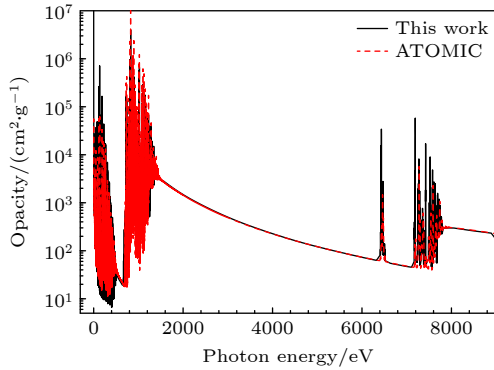


图 8 密度为 0.001 g/cm^3 、温度为 100 eV 的 Fe 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件的结果

Fig. 8. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Fe plasma at a density of 0.001 g/cm^3 and a temperature of 100 eV .

图 9 所示为本文计算的铁等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果的比较, 铁等离子体的密度为 0.001 g/cm^3 , 温度为 10 eV . 总的来说, 两个计算结果基本符合, 特别是光子能量小于 6000 eV 时连续不透明度的计算结果吻合很好, 但是两者之间也存在明显差异, 主要体现在 L-和 K-壳层的跃迁以及光子能量高于 7200 eV 时的连续不透明度. 对于 L-和 K-壳层的谱线跃迁引起的吸收, ATOMIC 明显缺失了一些谱线, 说明 ATOMIC 在计算原子参数方面存在一定的缺陷. 本文计算包括了完整的原子参数, 显示了完整的吸收结构.

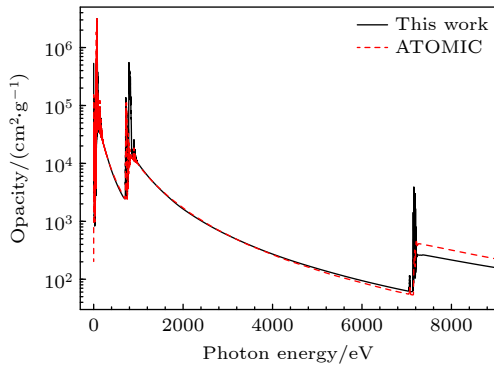


图 9 密度为 0.001 g/cm^3 、温度为 10 eV 的 Fe 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件的结果

Fig. 9. Comparison of opacity obtained by present work and ATOMIC code for Fe plasma at a density of 0.001 g/cm^3 and a temperature of 10 eV .

为了更清楚地展示谱线的吸收结构, 图 9 在光子能量 $0\text{--}1200\text{ eV}$ 区域的不透明度放大图见图 10. 可以看出, 位于光子能量在 $700\text{--}1000\text{ eV}$ 区域的吸收结构, 本工作与 ATOMIC 的计算结果部分符合很好, 但是在有些光子能量区域差异很大, 对能量最低的 $2p\text{-}3s$ 吸收 (光子能量在 730 eV 附近), 本工作与 ATOMIC 计算符合极好, 不管是强度还是谱线形状都吻合得很好, 但是对最强的 $2p\text{-}3d$ 跃迁引起的吸收 (光子能量在 820 eV 附近的更宽光子能量范围的吸收), ATOMIC 基本上没有给出, 这导致了在光子能量 $800\text{--}870\text{ eV}$ 区域, 两个理论结果存在很大的差异. 显然, ATOMIC 程序在计算等离子体辐射不透明度的某些方面还存在一定的缺陷.

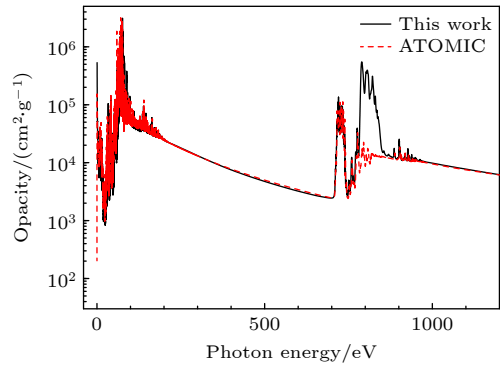


图 10 Fe 等离子体不透明度图 9 在光子能量 $0\text{--}1200\text{ eV}$ 范围内的放大, 密度为 0.001 g/cm^3 、温度为 10 eV 的 Fe 等离子体不透明度与 ATOMIC 软件计算的结果比较, 其中实线为本工作得到的结果, 红虚线为 ATOMIC 软件得到的结果

Fig. 10. Comparison of opacity in a photon energy range of $0\text{--}1200\text{ eV}$ obtained by present work and ATOMIC code for Fe plasma at a density of 0.001 g/cm^3 and a temperature of 10 eV .

通过上述与国际上最为精确的 ATOMIC 计算软件的比较, 可以看出, 本工作计算的不透明度精度至少与 ATOMIC 相当, 在某些方面有所提高, 比如, 本工作计算原子参数的完整性要好于 ATOMIC 软件, 计算中光谱分辨的不透明度展现了更为丰富完整的谱线吸收结构.

从图 1—图 10 可以看出, 对于低 Z 的铝等离子体 (图 1—图 4), 由束缚-自由部分贡献的连续不透明度, 本文计算与 ATOMIC 的结果都符合得很好; 但是, 对于中 Z 的铁等离子体 (图 5—图 10), 对于束缚-自由部分贡献的连续不透明度, 本文计算与 ATOMIC 的结果部分符合很好 (比如图 8 和图 10),

表 2 铁等离子体在不同密度和不同温度 T 条件下的 Rosseland 和 Planck 平均不透明度 (cm^2/g)
Table 2. Rosseland and Planck mean opacities (cm^2/g) of Fe plasmas at different densities and different temperatures.

T/eV	0.001 g/cm^3		0.005 g/cm^3		0.01 g/cm^3		0.05 g/cm^3		0.1 g/cm^3	
	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck
2	69215	122715	93585	143915	101029	143805	100652	120432	85765	113541
5	9788	13619	23498	27432	31742	35133	48273	52965	52803	61748
10	5315	29879	12131	32782	16194	34114	26873	38585	31552	42038
20	7161	36974	12584	43595	15700	46071	25757	50931	31150	54002
50	1445	5884.9	4158	12006	5332.3	14315	7820.3	16013	8793	16451
100	28.18	1047.9	103.6	1480.7	191.43	1796.2	698.52	2675.0	1064	3285.1
150	26.39	1153.8	76.25	1883.5	114.02	2283.2	257.79	3101.6	358.9	3324.9
200	9.206	507.14	49.10	1130.5	87.143	1487.9	245.45	2462.3	349.5	2887.7
250	2.560	118.79	15.45	424.09	36.795	661.47	173.29	1455.3	280.1	1878.9
300	1.009	28.096	5.710	127.37	13.817	229.07	79.424	685.91	158.0	1000.9

但是其他如图 5—图 7 和图 9 结果存在差异. 造成这些差异的原因比较复杂, 首先是两种理论方法处理束缚-自由部分的计算方案不尽相同, 从而计算的光电离截面可能存在差异, 其次对等离子体电离平衡的处理也存在不一样的地方, 这样两种方法计算的束缚-自由部分贡献的连续不透明度结果可能存在差异. 自由-自由不透明度存在差异的原因, 与束缚-自由部分贡献的不透明度存在差异的原因类似.

表 2 列出了铁等离子体在密度为 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1 g/cm^3 和温度为 2, 5, 10, 20, 50, 100, 150, 200, 250, 300 eV 条件下的 Rosseland 和 Planck 平均不透明度. 可以得到与铝等离子体类似的规律, 在给定的温度下, Rosseland 和 Planck 平均不透明度都随密度增大而增大, 在给定的密度下, Rosseland 和 Planck 平均不透明度一般随温度增大而减小, 但是在局部温度区域有时会违反这一规律 (如温度为 10 eV 和 20 eV 时).

3.3 金等离子体

对于高 Z 元素, 公开发表的不透明度数据很少, 据文献查询, 在 21 世纪初期发表了一个金等离子体辐射不透明度的实验结果, 等离子体温度只有 20 eV^[20]. 因而金等离子体辐射不透明度的评估, 一般只好依赖比较精确的理论方法.

图 11 所示为 Au 等离子体在密度为 0.01 g/cm^3 , 温度分别为 10, 20, 40, 100, 200 eV 条件下的辐射不透明度, 为了更好地显示不透明度的细节, 光子能量范围被限定为 0—6000 eV, 更高光子能量的不透明度基本上没有显示出明显的谱线吸收结构, 图中未显示. 可以看出, 随着温度的升高, 谱线吸收对不透明度的贡献越来越大, 而在温度较低时,

连续不透明度 (包括光电离和自由-自由的贡献) 起着更为重要的作用. 在等离子体温度为 10 eV 时, 谱线吸收只在光子能量小于 300 eV 时起比较重要的作用, 在光子能量大于 300 eV 时, 连续吸收起着主导的贡献. 在这一等离子体条件下, 主要的离子类型为 $[\text{Xe}]4f^{14}5s^25p^65d^n$, 5d 为开壳层, 分布着 0—5 个电子, 谱线吸收主要起源于电子轨道 4f, 5s, 5p, 5d 上电子的吸收. 在较低温度 10 和 20 eV 的条件下, 较深的电子轨道, 如 3s, 3p, 3d, 2s, 2p, 1s 等引起的谱线吸收被大幅度抑制, 来自于这些深的电子轨道的不透明度主要由连续的光电离过程决定.

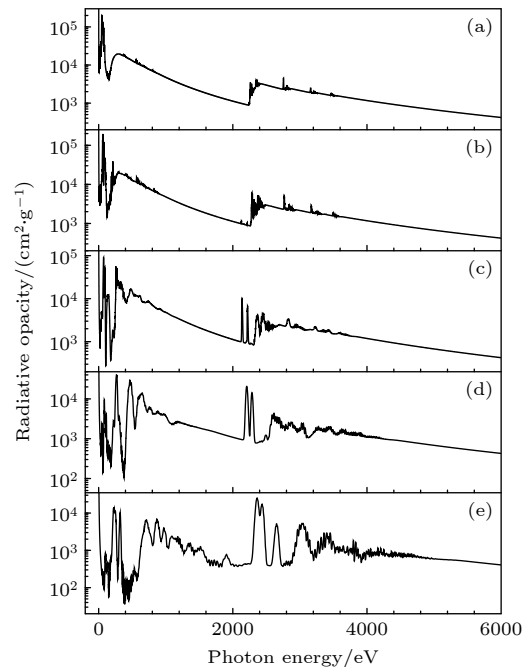


图 11 密度为 0.01 g/cm^3 、温度分别为 10, 20, 40, 100, 200 eV 条件下的 Au 等离子体不透明度

Fig. 11. Opacity of Au plasma at a density of 0.01 g/cm^3 and temperatures of 10, 20, 40, 100, 200 eV.

随着温度的升高, 这些内壳层引起的谱线吸收不断被释放出来, 对不透明度的贡献越来越大, 等离子体温度到 100 eV 时, 线谱的贡献很重要, 这些谱线吸收主要分布在较低光子能量区域 (小于 1200 eV) 和较高光子能量区域 (高于 2000 eV). 为了更清楚地显示这些吸收结构, 这两个主要谱线吸收结构放大图见图 12, 其显示了 Au 等离子体在密度为 0.01 g/cm³、温度为 100 eV 条件下的辐射不透明度, 主要的谱线吸收结构标注在图中. 可以看出, 在较低的光子能量范围, 主要的谱线吸收来自于从主量子数为 4 的辐射跃迁, 其中从 4f 电子跃迁的谱线为最强, 例如 4f-5d, 4f-5g, 4f-6d, 4f-6g, 4f-7d 等类型的谱线.

在较高的光子能量范围, 从图 12(b) 可以看出, 主要的谱线吸收来自于从主量子数为 3 的辐射跃迁, 其中从 3d 电子跃迁的谱线为最强, 例如 3d-4f, 3d-5f, 3d-6f 等类型的谱线, 此外, 3d-4p, 3d-5p, 3p-4d, 3p-5d, 3p-6d 等跃迁类型也有一定的贡献. 在等离子体在密度为 0.01 g/cm³, 温度为 100 eV 条件下, 谱线吸收的峰值已经远大于连续吸收的不透明度, 显示了在 100 eV 的温度下, 等离子体辐射不透明度的特性已经完全不同与在温度为 10 eV 时的特性, 表明了不同离子价态辐射特性的不同.

表 3 列出了金等离子体在密度为 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1 g/cm³ 和温度为 2, 5, 10, 20, 50, 100, 150, 200, 250, 300 eV 条件下的 Rosseland 和 Planck 平均不透明度. 在给定的温度下, 与铝和铁等离子体一样, Rosseland 和 Planck 平均不透明度都随密度增大而增大, 在给定的密度下, 与铝和铁等离子体不同, Rosseland 和 Planck 平均不透明度随温度增加而减小, 没有表现出振荡性.

表 3 金等离子体在不同密度和不同温度 T 条件下的 Rosseland 和 Planck 平均不透明度 (cm²/g)
Table 3. Rosseland and Planck mean opacities (cm²/g) of Au plasmas at different densities and different temperatures.

T/eV	0.001 g/cm ³		0.005 g/cm ³		0.01 g/cm ³		0.05 g/cm ³		0.1 g/cm ³	
	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck	Rosse.	Planck
2	25768	51205	43857	54878	49268	53670	44582	43170	35752	35122
5	15954	38279	30437	44722	37862	46872	46119	47813	43420	45362
10	14646	43051	21935	48723	26683	51154	36889	55148	39932	55264
20	3779	30135	5571	34903	6315	36553	8716	39240	10146	39855
50	1565	7258	1922	8683	2099	9326	2711	10886	3113	11492
100	594.7	5570	882.9	6501	1041	6926	1648	7894	2108	8307
150	346.7	2781	683.5	3523	922.5	3890	1460	5088	1707	5579
200	181.2	1239	383.6	1830	495.8	2099	874.0	2838	1093	3156
250	57.16	529.3	212.2	932.5	298.4	1127	561.7	1679	699.8	1945
300	11.19	342.6	69.32	573.9	138.7	717.1	349.9	1093	456.5	1284

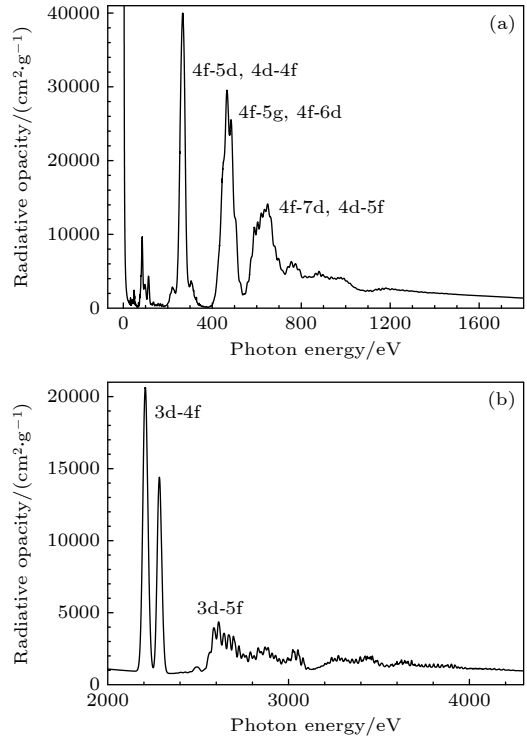


图 12 密度为 0.01 g/cm³、温度为 100 eV 条件下的 Au 等离子体不透明度在两个主要谱线吸收区域的放大

Fig. 12. Opacity of Au plasma at a density of 0.01 g/cm³ and a temperature of 100 eV contributed dominantly by line absorption.

4 讨论部分

不透明度的研究已经取得了很大的进展, 由于其在惯性约束聚变等领域的重要性, 不管是实验^[38-40]还是理论^[41,42]研究, 都还在不断发展和研究中. 随着惯性约束聚变点火的成功, 对不透明度等物理参数的精度需求会进一步提高, 这给实验和理论研究提出了更大的挑战.

本文主要涉及密度范围在 10^{-3} — 10^{-1} g/cm³ 的稀薄等离子体, 对于密度高于 0.1 g/cm³ 的稠密等离子体, 特别是在固体密度及固体密度以上, 不透明度的研究会有一些新颖的物理效应, 我们对其中的物理性质还需要进一步加深理解. 首先对与不透明度紧密相连的电离平衡, 需要进一步考虑等离子体中各种带电粒子之间的复杂多体相互作用, 特别是在 Saha 电离平衡方程中, 目前学界普遍假设自由电子在空间均匀分布, 在稠密等离子体中需要考虑自由电子空间非均匀分布引起的物理效应^[43,44]. 同时, 在稠密等离子体中, 连续电子不断与其他带电粒子之间的频繁碰撞, 导致连续电子不能在全物理空间中自由运动, 而是局限在有限的空间中. 这就是微观原子过程中连续电子的瞬时空间局域化现象^[45], 这一现象通常导致连续原子过程截面的增大^[46-48], 相应地, 也导致不透明度的增大^[49]. 对于非平衡的等离子体, 不同量子态的粒子分布动力学则需要更为复杂的考虑^[50].

5 结 论

通过系统的理论研究, 得到了铝、铁和金等离子体在密度 0.001—0.1 g/cm³ 和温度 1—300 eV 范围光谱分辨的辐射不透明度, 同时也确定了 Rosseland 和 Planck 平均不透明度. 对中低 Z 的铝和铁, 与国际上 ATOMIC 程序得到的结果进行比较, 分析两种方法得到结果的异同. 对于铝等离子体, 在本文研究的大部分等离子体条件下, 两者结果符合较好, 特别是束缚-自由部分贡献的不透明度, 本文计算结果与 ATOMIC 的结果吻合非常好, 对于较低温度的铝等离子体 (比如 10 eV 的温度), 对于内壳层谱线跃迁引起的不透明度, 我们发现 ATOMIC 程序有一些谱线缺失的情况. 对于中 Z 的铁等离子体, 本文计算的不透明度总体上与 ATOMIC 计算结果符合, 特别对于束缚-自由部分贡献的连续不透明度, 我们的结果与 ATOMIC 部分符合较好, 但是有些等离子体条件下有一定差异. 造成这些差异的原因, 首先是两种理论方法处理束缚-自由部分的计算方案不尽相同, 从而计算的光电离截面可能存在差异, 其次对等离子体电离平衡的处理也存在不一样的地方, 这样决定粒子数目的电荷态分布也会不同, 从而导致两种方法计算的束缚-自由部分贡献的连续不透明度结果可能存

在差异. 对于高 Z 的金等离子体, 文献上发表的数据非常有限, 本课题展开了系统性研究, 结果为不透明度研究提供了参考.

国际上 ATOMIC 计算程序被证明是不透明度计算精度比较高的程序之一, 本项目在密度 0.001—0.1 g/cm³ 和温度 1—300 eV 范围内的大量数据研究表明, ATOMIC 计算程序在较低温度时, 计算的不透明度在高光子能量范围内存在谱线丢失的情况, 从而影响 X-射线的辐射输运研究. 本文的计算在原子参数的考虑中, 已经系统地全面包括了所有可能的谱线吸收和光电离通道, 因而杜绝了这种谱线丢失的可能性. 这也进一步表明, 不透明度的计算涉及到特定等离子体条件下的大量量子态, 在复杂的金等离子体条件下, 量子态的数目可能以亿计, 甚至达到万亿乃至更大, 因而其精确的研究显然具有很大的挑战性. 在这种情况下, 一些简化的处理是有其意义的, 比如不可分辨跃迁系模型甚至平均原子模型都有其存在和发展的必要.

数据可用性声明

支撑本研究数据的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.22232> 中访问获取.

感谢“宽区温度密度条件原子分子数据库”项目对本课题的资助.

参考文献

- [1] Hurricane O A, Patel P K, Betti, R, Froula D H, Regan S P, Slutz S A, Gomez M R, Sweeney M A 2023 *Rev. Mod. Phys.* **95** 025005
- [2] Davidson S J, Foster J M, Smith C C, Warburton K A, Rose S J 1988 *Appl. Phys. Lett.* **52** 847
- [3] Perry T S, Davidson S J, Serduke F J D, Bach D R, Smith C C, Foster J M, Doyas R J, Ward R A, Iglesias C A, Rogers F J, Abdallah Jr J, Stewart R E, Kilkenny J D, Lee R W 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3784
- [4] Qiang Y, Ye F, Lu J, Yan X S, Yang R H, Jiang S Q, Ning J M, Zhou L, Chen F X, Yang J L, Wang D M, Xu Z P, You H B, Zhang F Q, Li Z H, Wang G Q, Xiao D L, Wu Z Q, Meng S J, Huang X B, Xu Q, Zhou S T, Zhang D Y, Zhang S Q, Ren X D, Ji C, Li Y, Cai P T, Ren J, Chen S, Zhang H Y 2024 *Phys. Rev. E* **110** 065205
- [5] Zeng J L, Jin F T, Yuan J M 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 924
- [6] Zeng J L, Jin F T, Yuan J M, Lu Q S 2000 *Phys. Rev. E* **62** 7251
- [7] Zeng J L, Yuan J L, Lu Q S 2001 *Phys. Rev. E* **64** 066412
- [8] Zeng J L, Yuan J M 2002 *Phys. Rev. E* **66** 016401
- [9] Jin F T, Zeng J L, Yuan J M 2004 *Phys. Plasmas* **11** 4318

- [10] Winhart G, Eidmann K, Iglesias C A, Bar-Shalom A 1996 *Phys. Rev. E* **53** R1332
- [11] Springer P T, Fields D J, Wilson B G, Nash J K, Goldstein W H, Iglesias C A, Rogers F J, Swenson J K, Chen M H, Bar-Shalom A, Stewart R E 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 3735
- [12] Bailey J E, Rochau G A, Iglesias C A, Abdallah Jr J, MacFarlane J J, Golovkin I, Wang P, Mancini R C, Lake P W, Moore T C, Bump M, Garcia O, Mazevet S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 265002
- [13] Zhang J Y, Li H, Zhao Y, Xiong G, Yuan Z, Zhang H Y, Yang G H, Yang J M, Liu S Y, Jiang S E, Ding Y K, Zhang B H, Zheng Z J, Xu Y, Meng X J, Yan J 2012 *Phys. Plasmas* **19** 113302
- [14] Jin F T, Zeng J L, Yuan J M 2003 *Phys. Rev. E* **68** 066401
- [15] Zeng J L, Jin F T, Zhao G, Yuan J M 2003 *Chin. Phys. Lett.* **20** 862
- [16] Gao C, Zeng J L 2008 *Phys. Rev. E* **78** 046407
- [17] Jin F T, Zeng J L, Yuan J M 2004 *Chin. J. Comput. Phys.* **21** 121 (in Chinese) [靳奉涛, 曾交龙, 袁建民 2004 计算物理 **21** 121]
- [18] Bailey J E, Nagayama T, Loisel G P, Rochau G A, Blancard C, Colgan J, Cosse Ph, Faussurier G, Fontes C J, Gilleron F, Golovkin I E, Hansen S B, Iglesias C A, Kilcrease D P, MacFarlane J J, Mancini R C, Nahar S N, Orban C, Pain J C, Pradhan A K, Sherrill M E, Wilson B G 2015 *Nature* **517** 56
- [19] Nagayama T, Bailey J E, Loisel G P, Dunham G S, Rochau G A, Blancard C, Colgan J, Cosse Ph, Faussurier G, Fontes C J, Gilleron F, Hansen S B, Iglesias C A, Golovkin I E, Kilcrease D P, MacFarlane J J, Mancini R C, More R M, Orban C, Pain J C, Sherrill M E, Wilson B G 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 235001
- [20] Eidmann K, Bar-Shalom A, Saemann A, Winhart G, 1998 *Europhys. Lett.* **44** 459
- [21] Zhang J Y, Xu Y, Yang J M, Yang G H, Li H, Yuan Z, Zhao Y, Xiong G, Bao L H, Huang C W, Wu Z Q, Yan J, Ding Y K, Zhang B H, Zheng Z J 2011 *Phys. Plasmas* **18** 113301
- [22] Zhang J Y, Yang G H, Yang J M, Ding Y N, Zhang B H, Zheng Z J, Yan J 2007 *Phys. Plasmas* **14** 103301
- [23] Zeng J L, Zhao G, Yuan J M 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 660
- [24] Zeng J L, Yuan J M 2006 *Phys. Rev. E* **74** 025401(R)
- [25] Zeng J L, Yuan J M 2007 *Phys. Rev. E* **76** 026401
- [26] Zeng J L 2008 *J. Phys. B* **41** 125702
- [27] Gao C, Zeng J L, Jin F T, Yuan J M 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 419
- [28] Zeng J L 2005 *Detailed Term Accounting Investigation on Opacity of Aluminium Plasmas* (Changsha: National University of Defense Technology Press) (in Chinese) [曾交龙 2005 使用细致谱项模型研究铝等离子体的辐射不透明度 (长沙: 国防科技大学出版社)]
- [29] Zeng J L, Jin F T, Yuan J M 2006 *Front. Phys. China* **1** 468
- [30] Jin F T, Zeng J L, Yuan J M 2005 *Physics* **34** 820 (in Chinese) [靳奉涛, 曾交龙, 袁建民 2005 物理 **34** 820]
- [31] Zeng J L, Yuan J M, Zhao Z X, Lu Q S 2001 *High Power Laser Part.* **13** 60 (in Chinese) [曾交龙, 袁建民, 赵增秀, 陆启生 2001 强激光与粒子束 **13** 60]
- [32] Iglesias C A, Rogers F J 1991 *Astrophys. J.* **371** 408
- [33] Seaton M J, Yan Y, Mihalas D, Pradhan A K 1994 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **266** 805
- [34] Hansen S B, Bauche J, Bauche-Arnoult C, Gu M F 2007 *High Energy Density Phys.* **3** 109
- [35] Porcherot Q, Pain J C, Gilleron F, Blenski T A 2011 *High Energy Density Phys.* **7** 234
- [36] Blancard C, Cosse P, Faussurier G 2012 *Astrophys. J.* **745** 10
- [37] Colgan J, Kilcrease D P, Magee Jr N H, Armstrong G S J, Abdallah Jr J, Sherrill M E, Fontes C J, Zhang H L, Hakel P 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 369
- [38] Xiong G, Qing B, Zhang Z Y, Jing L F, Zhao Y, Wei M X, Yang Y M, Hou L F, Huang C W, Zhu T, Song T M, Lv M, Zhao Y, Zhang Y X, Yang G H, Wu Z Q, Yan J, Zou Y M, Zhang J Y, Yang J M 2024 *MRE* **9** 047801
- [39] Qing B, Zhang Z Y, Wei M X, Yang Y M, Yang Z W, Yang G H, Zhao Y, Lv M, Xiong G, Hu Z M, Zhang J Y, Yang J M, Yan J 2018 *Phys. Plasmas* **25** 023301
- [40] Gang X, Yang J M, Zhang J Y, Hu Z M, Zhao Y, Qing B, Yang G H, Wei M X, Yi R Q, Song T M, Li H, Yuan Z, Lv M, Meng X J, Xu Y, Wu Z Q, Yan J 2016 *Astrophys. J.* **816** 36
- [41] Gao C, Liu Y B, Yan G B, Yan J, Chen X Q, Hou Y, Jin F T, Wu J H, Zeng J L, Yuan J M 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 183101 (in Chinese) [高城, 刘彦鹏, 严冠鹏, 闫杰, 陈小棋, 侯永, 靳奉涛, 吴建华, 曾交龙, 袁建民 2023 物理学报 **72** 183101]
- [42] Li R, Lv H N, Sang J Q, Liu X H, Liang G Y, Wu Y 2024 *Chin. Phys. B* **33** 053101
- [43] Zeng J L, Li Y J, Hou Y, Yuan J M, 2023 *Phys. Rev. E* **107** L033201
- [44] Huang Y H, Liang Z H, Zeng J L, Yuan J M 2024 *Phys. Rev. E* **109** 045210
- [45] Liu P F, Gao C, Hou Y, Zeng J L, Yuan J M 2018 *Commun. Phys.* **1** 95
- [46] Zeng J L, Li Y J, Yuan J M 2021 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **272** 107777
- [47] Zeng J L, Jiang X B, Gao C, Wu J H, Yuan J M, 2024 *Results Phys.* **58** 107522
- [48] Zeng J L, Ye C, Liu P F, Gao C, Li Y J, Yuan J M 2022 *Int. J. Mol. Sci.* **23** 6033
- [49] Zeng J L, Gao C, Liu P F, Li Y J, Meng C S, Hou Y, Kang D D, Yuan J M 2022 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **65** 233011
- [50] Gao C, Zeng J L, Li Y Q, Jin F T, Yuan J M 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 583

SPECIAL TOPIC—Atomic, molecular and materials properties data

Database of radiation opacity of low-density aluminum, iron and gold plasmas^{*}

ZENG Jiaolong^{1)3)†} GAO Cheng³⁾ YUAN Jianmin^{2)‡}

1) (*School of Physics, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310023, China*)

2) (*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China*)

3) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

(Received 8 March 2025; revised manuscript received 27 April 2025)

Abstract

Radiative opacity plays an important role in investigating radiative transfer, radiation hydrodynamics and other relative disciplines. In practical applications, these data are mainly obtained by theoretical calculations. The accuracy of the theories is checked by limited experiments. Within the theoretical framework of detailed level accounting model, systematic theoretical investigations of the radiative opacity of plasmas such as aluminum, iron, and gold plasmas are conducted. A database of spectrally resolved radiative opacities and Rosseland and Planck mean opacities is established for densities ranging from 0.001 to 0.1 g/cm³ and temperatures from 1 to 300 eV. A data base is built based on these theoretical opacities. A huge number of quantum states are involved in the calculation of opacity, especially for high-*Z* gold plasmas. This poses a great challenge for obtaining accurate opacity of gold plasma. For such high-*Z* plasmas, it is necessary to develop other codes such as unresolved transition arrays or even average atom models to quickly obtain the opacity. Accurate opacity data are very lacking for such high-*Z* plasmas and the data presented in this library provides important references for other less detailed opacity codes.

For aluminum and iron plasmas, their opacities are compared with those from the code ATOMIC. It is found that they are in good agreement for most cases of plasma conditions. Yet, discrepancies are still found in a few cases of plasma densities and temperatures, as indicated in the figures shown in the text. At photon energy of approximately 850 eV, however, some strong lines of aluminum plasma are notably absent in Al plasma generated by other codes, which will affect the radiative transfer in the X-ray region. In our code, we avoid such problems by including all possible line absorption and photoionization channels. The present dataset should be helpful in studying inertial confinement fusion, plasma physics and astrophysics. All the data presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.22232>.

Keywords: opacity, aluminum, iron and gold plasma, configuration interaction, detailed level accounting model

PACS: 52.25.Os, 31.15.am, 32.30.-r, 31.15.A-

DOI: [10.7498/aps.74.20250301](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250301)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250301](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250301)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12174343, 12274384, 12335015).

[†] Corresponding author. E-mail: jlzeng@zjut.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: yuanjianmin@jlu.edu.cn

低密度铝铁金等离子体辐射不透明度数据库

曾交龙 高城 袁建民

Database of radiation opacity of low-density aluminum, iron and gold plasmas

ZENG Jiaolong GAO Cheng YUAN Jianmin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 125202 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250301

CSTR: 32037.14.aps.74.20250301

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250301>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

局域热平衡Sn等离子体极紫外辐射不透明度和发射谱的理论研究

Theoretical investigation on extreme ultraviolet radiative opacity and emissivity of Sn plasmas at local-thermodynamic equilibrium

物理学报. 2023, 72(18): 183101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230455>

分子离子, 和态的不透明度

Molecular opacities of $A^2\Pi_u$ and states of nitrogen cation

物理学报. 2022, 71(19): 193101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220734>

氮气分子电子态的不透明度

Opacities of electronic states for nitrogen molecule

物理学报. 2022, 71(14): 143102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220043>

激光锡等离子体的状态参数分布和极紫外波段辐射的模拟研究

Numerical simulation of state parameter distributions and extreme ultraviolet radiation in laser-produced tin plasma

物理学报. 2025, 74(3): 033201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241321>

基于组态相互作用方法对AuB分子低激发态电子结构和光学跃迁性质的研究

Study of electronic structure and optical transition properties of low-lying excited states of AuB molecules based on configuration interaction method

物理学报. 2024, 73(5): 053101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231347>

电子束透射氮化硅薄膜窗产生低密度等离子体

Low-density plasmas generated by electron beams passing through silicon nitride window

物理学报. 2024, 73(14): 144102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240302>