用于高保真原子动力学的混合碰撞-辐射建模

Prashant Sharma, [1, a)] Christopher J. Fontes, [2] Mark Zammit, [1] James Colgan, [1] Nathan Garland, [1, 3, 4] 和 Xian-Zhu Tang[1, b)]1)洛斯阿拉莫斯国家实验室理论部，美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮编 *87545*2)洛斯阿拉莫斯国家实验室计算物理部，美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮编 *87545*3)格里菲斯大学昆士兰量子与先进技术研究所，澳大利亚昆士兰州内森，邮编 *4111*4)格里菲斯大学环境与科学学院，澳大利亚昆士兰州内森，邮编 *4111*

arXiv:2601.17308v1 [physics.plasm-ph] 24 Jan 2026

碰撞-辐射（CR）模型的保真度对于深入理解聚变等离子体中的辐射性质和电离平衡至关重要。本文提出并评估了混合碰撞-辐射方案，将精细结构分辨与超组态平均相结合，在准确性与计算效率之间实现了实用的折中。我们针对氦、锂和铍开发了两种混合碰撞-辐射模型：在选定的主量子数范围内保留详细的精细结构态，同时将更高能级的态进行统计平均，形成超组态。我们运用这些模型，在广泛的电子温度和密度范围内计算辐射功率损失，以及平均和有效电荷态。通过与完全精细结构分辨的碰撞-辐射模型进行基准比较，评估混合方法的准确性。研究结果表明，混合碰撞-辐射方案用途广泛，适用于需要在预测保真度与计算成本之间取得平衡的精细等离子体模拟。

a)电子邮箱：phyprashant@gmail.com
b)电子邮箱：xtang@lanl.gov

I. 引言

原子动力学模型对于准确模拟原子能级布居及其演化至关重要，这对于理解广泛的等离子体现象不可或缺。这些模型描述不同等离子体条件下离子电荷态、激发态和电子分布的动态行为，以及电子碰撞激发与退激发、电离与复合、辐射衰变等各种原子过程对等离子体演化的影响。通过将原子过程层面的原子碰撞微观细节与等离子体整体行为联系起来，可靠的原子动力学模型能够准确预测辐射性质、电离平衡和等离子体输运性质[1]。因此，此类模型在众多应用领域中不可或缺，包括磁约束聚变[2,3]，惯性约束聚变[4,5]，天体物理[6] 和大气等离子体[7]，，以及用于半导体加工[8] 和等离子体医学应用[9]的实验室低温等离子体。

传统上，等离子体条件通常采用较为简单的原子动力学模型进行近似。对于高密度、达到热平衡的等离子体，通常使用局部热力学平衡（LTE）模型，该模型假设原子能级布居在局部温度下遵循玻尔兹曼分布，并且可以忽略非平衡过程。在极低密度且光学薄的等离子体中——天体物理日冕便是典型例子——通常采用日冕平衡（碰撞电离）近似，该模型假设自发辐射衰变过程在碰撞过程中占主导地位。尽管这些近似大幅降低了计算需求，但其准确性仅限于特定条件，因为在电子密度处于中间范围、存在复杂的电离或复合过程（例如电荷交换），或存在非麦克斯韦电子分布[10]的情况下，它们可能失效。此外，在大多数实验室和天体物理等离子体中，日冕平衡极限和LTE极限都不能严格适用。在这些中间状态下，碰撞-辐射（CR）模型通过同时考虑电子碰撞过程、辐射跃迁和有限密度效应，提供了更为通用的描述。与简单方法相比，CR模型在概念上的限制更少，能够连接近日冕区间和近LTE区间。事实上，在低密度极限下，CR模型退化为日冕近似；而在高密度下，则趋近于LTE布居。

然而，这种通用性和高保真度需要付出相当大的计算成本。精细的碰撞-辐射模型可能计算开销很大，尤其是在包含越来越详

细的原子结构数据时。对于中、高Z元素，电子组态和精细结构能级的数量会迅速增加，通常随主量子数n和总电子占据数呈组合式增长。例如，从组态平均模型转为完全精细结构分辨模型，耦合能级的数量可能增加一个到两个数量级。由此产生的速率方程矩阵，对于中Z离子而言，轻易就会超过10^4到10^5个能级。每增加一个能级，就会引入新的辐射衰变通道、电子碰撞激发和退激过程、自电离以及复合速率，这些都必须以自洽的方式进行跟踪。

因此，速率矩阵会变得极其庞大且稠密，即使使用先进的求解器，也会给内存和计算时间带来巨大压力[11]。对于中等Z等离子体，完整的精细结构碰撞-辐射计算可能需要数GB内存和数小时的CPU时间。复杂度的迅速增长，成为高Z等离子体精细建模的一大瓶颈，也促使人们寻求计算效率更高的方法，同时保留关键等离子体可观测量的保真度，例如平均电荷态、辐射功率损失和电荷态分布。

为应对这些计算挑战，我们采用一种混合碰撞-辐射方案[12]，将精细结构分辨与超组态平均相结合，并应用于氦、锂和铍等离子体物种。本研究开发了两种变体。主要模型Hybrid-($n_{\mathrm{valence}}+4$)保留截至$n_{\mathrm{valence}}+4$的所有能态并进行精细结构分辨，同时对较高能态（截至$n = 10$）进行统计平均；此外，我们还构建了一个简化版本Hybrid-(n_{valence})，用于考察收敛行为。这里，n_{valence}表示原子或离子基态中最高占据壳层的主量子数。我们的方法有一个关键特点：以完全精细结构分辨的能级集合及其对应的原子数据为基础，仅将较高能态系统地归并为超组态。这种策略显著减少了能级和跃迁的数量，在保留关键原子结构细节的同时提高了计算效率。该混合框架也提供了更通用的基础，因为碰撞速率和辐射速率是直接根据精细结构分辨的截面和速率计算得出，而非基于预先平均的量。本研究在稳态条件下，将混合模型的性能与相同物种的完全精细结构分辨碰撞-辐射模型进行比较，并在广泛的电子温度和电子密度范围内评估辐射功率损失、平均电荷态和有效电荷态。

用于高保真原子动力学的混合碰撞-辐射建模

II. 碰撞辐射模型

碰撞-辐射模型通过一组耦合速率方程描述原子态布居数随时间的演化，这些方程涵盖了连接不同能级的所有过程，

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j\neq i} N_j R_{j\to i} - N_i \sum_{j\neq i} R_{i\to j}, \tag{1}$$

其中，N_i 和N_j 分别表示原子态i 和j的布居数（或数密度），而$R_{i\to j}$表示从态i跃迁到态j的跃迁速率（逆向速率$R_{j\to i}$的定义类似）。这些速率涵盖电子碰撞激发（EIE）和去激发（EIDE）、自发辐射跃迁、电子碰撞电离（EII）、三体复合（3BR）和辐射复合（RR）等过程，以及其他相关过程。这些速率的准确性在很大程度上取决于所用原子数据的质量。要获得可靠的碰撞-辐射模型，应将这些数据与高质量的实验或理论参考结果进行基准比较，以确保准确表征相关原子物理过程。

虽然时间相关的表述对于理解瞬态等离子体行为至关重要，例如等离子体密度、温度或入射辐射快速变化所引起的瞬态行为，但许多实际情况允许进行简化。当等离子体状态的变化速度远慢于布居数重新分布的时间尺度时，通常采用稳态近似。在这种情况下，布居分布与时间无关，速率方程可简化为

$$\sum_{j\neq i} N_j R_{j\to i} - N_i \sum_{j\neq i} R_{i\to j} = 0. \tag{2}$$

求解由此得到的代数方程组，无需额外承担时间积分的计算成本，即可求得原子动力学。此类稳态碰撞辐射模型常用于诊断用途和光谱解释，适用于长期稳定或缓慢变化的条件。

A. 聚变碰撞-辐射（FCR）代码

在本工作中，我们采用了近期开发的 FCR 代码，用于研究宽范围等离子体条件下的电离平衡和辐射性质，尤其侧重于与聚变能源应用相关的条件。该代码支持多个细化级别[13]，

每种方法都旨在实现计算成本与精度之间的最佳平衡。例如，对于低Z元素，采用精细结构细化；对于中高Z元素，则采用混合方法或平均方法（组态平均和超组态）。

FCR 的一项关键优势是其自适应框架，可根据截面和速率系数的可用情况有选择地将其纳入计算。该代码在可能的情况下优先使用截面数据，从而能够处理任意电子能量分布函数。这一特性使 FCR 非常适用于麦克斯韦核等离子体以及非麦克斯韦边缘或边界等离子体，在后者中可能出现动量空间空洞[14–16]、温度各向异性[15], 双麦克斯韦分布[17], 和超热电子群体[18–20] 等现象。

对于速率计算，FCR 采用自适应高斯–克朗罗德求积法[21], ，通过增加额外的积分点扩展标准高斯求积。这种方法提高了精度，尤其适用于具有奇异性或剧烈梯度的函数，同时不会引入显著的计算成本。在本研究中，为确保清晰性和一致性，所有细化方案均使用麦克斯韦电子分布函数进行了评估。

B. 原子数据计算与改进方案，包括混合方案 e

本研究采用 Flexible Atomic Code (FAC)[22] 生成一套全面的原子数据，包括能级能量、振子强度、自发衰变速率，以及相关的正向过程截面和速率系数（电子碰撞激发、电子碰撞电离、光电离和俄歇电离）。这些数据被系统地纳入 FCR代码，以考察辐射性质和电离平衡。需要指出的是，中性靶的电子碰撞激发截面采用平面波玻恩（PWB）近似计算，而离子则采用扭曲波（DW）近似。相比之下，其他过程，包括电子碰撞电离、光电离和俄歇电离，对所有电荷态（包括中性原子）均采用DW方法处理。

这套方法为本研究中的碰撞-辐射建模提供了实用的基准，也为未来改进奠定了灵活的基础。特别是，该框架能够轻松纳入电子碰撞激发[23] 和电子碰撞电离[24,25], 的截面缩放程序，从而改进中性靶的截面，使其更接近R矩阵[26] 和收敛密耦合[27]等非微扰方法所得的结果。

然而，由于本工作的主要目标是建立并检验混合碰撞-辐射

建模策略方面，此处的讨论仍聚焦于精化方案本身及其对原子动力学的影响。

如前所述，碰撞-辐射模型可以由不同精化程度的态组成，体现了准确性与计算可行性之间的权衡。在最粗略的层级中，超组态碰撞-辐射模型[10] 仅根据主量子数（n）对能态进行分组，提供紧凑的表示，适用于只需低分辨率数据或计算资源有限的情形。更精细的方案是组态平均碰撞辐射模型[13,28–30]，它根据主量子数n和方位量子数（l）对能态进行分类，因此无需解析每个精细结构能级的全部复杂细节，也能捕捉更多结构信息。精细结构（J解析）模型[13,28,29,31] 通过考虑轨道电子相关角动量的耦合，实现了实际可行的最高精化程度，从而为每个原子能级确定一个总角动量J。

为突出不同细化方案对等离子体关键性质的影响，我们比较了电子密度为 $10^{12}\ \mathrm{cm}^{-3}$ 时氢的辐射功率损失，该结果分别由超组态、组态平均和精细结构碰撞 - 辐射模型计算得出，如图 1 所示。在当前的氢情形中可以看到，在曲线峰值附近，组态平均模型得到的辐射功率损失比精细结构模型低约 50%。这种差异源于“态排序问题”，即精细结构能级的能量排序（例如，对于 $n = 2$：$E^{2p_{1/2}} < E^{2s_{1/2}} < E^{2p_{3/2}}$）无法在组态平均后得到保留（例如，对于 $n = 2$，能量顺序变为：$E_{2s} < E^{2p}$）。此外（为明确起见，继续以 $n = 2$ 为例），$2s^{1/2}$ 能级的能量位于 $2p^{1/2}$ 能级和 $2p^{3/2}$ 能级之间，这意味着 $2s^{1/2}$ 能级可与源自 $2p$组态的两个能级分别发生激发和退激过程。若通过下文式（3）所示超组态表达式的组态平均对应形式计算组态平均速率和截面，这种情况会造成歧义。为解决这一歧义，我们在计算组态平均量时，选择排除 $2p_{1/2} \leftrightarrow 2s^{1/2}$ 跃迁的电子碰撞激发截面和辐射衰变率。采用这一选择后，在精细结构模型中可与较低能级发生偶极允许跃迁的 $2s^{1/2}$ 能级，在组态平均模型中成为 $2s$ 亚稳态（或禁戒）组态，导致两种模型在低密度下的布居数显著重新分布。$2s$ 亚稳态组态保留了相当数量无法用于偶极辐射的布居数，因此导致

图 1 所示辐射功率损失峰值降低。在更复杂的多电子系统中，组态平均可能比类氢情形更为复杂，因为共振能级和亚稳态能级可能源自同一组态。在这种情况下，组态平均模型会将亚稳态能级的布居数与产生偶极辐射的共振能级布居数合并，这通常会使组态平均碰撞辐射模型的辐射功率损失升高而非降低[32]。

与前文对复杂多电子系统的讨论类似，我们从图 1 中注意到，与精细结构模型相比，超组态模型给出的辐射功率损失大约高出 30%。这种高估源于将由某一 Layzer复合组态产生的所有亚稳态（或禁戒）能级[33] 与该复合组态中相应的共振能级归为一组。由于在低等离子体密度下，亚稳态能级可能具有相当大的布居，将它们与共振能级归为一组会人为增强偶极允许跃迁的发射。在完整的精细结构方案中，这些亚稳态能级会被显式处理，因此对总辐射功率损失的贡献会较小。因此，尽管组态平均方法和超组态方法相较于精细结构分辨碰撞-辐射模型具有计算优势，但它们可能会在预测辐射功率损失和平均电荷态等等离子体性质时引入系统误差。例如，在这一具体情况下，辐射功率损失高达 30–50% 的差异，将成为低温边界等离子体中碰撞等离子体能量输运不确定性的主导因素。这一问题尤其值得关注，具体包括：(i) 为聚变能反应堆设计等离子体功率排出和偏滤器脱靶解决方案；以及 (ii) 对当前实验进行定量解释。对于聚变能等实际应用，在选择碰撞-辐射建模的适当精细化程度时，必须考虑物理保真度。

为在完整性与计算可处理性之间取得平衡，我们采用了一种混合碰撞-辐射建模策略，其基本原理与Hansen等人[12], 相同，但所采用的方法明显不同。Hansen等人的方法从一套完整的相对论组态平均（RC）态及其速率出发，然后有选择地将部分日冕组态替换为详细的精细结构能级，同时将其余RC平均为非相对论组态或超组态。这种自上而下的构建方式确保了完整性，但依赖RC数据作为起点。相比之下，本研究从一套完全精细结构分辨的能级集出发，并系统地将高度激发态或类似连续态的态（下文将对此进行描述）聚合为超组态。这种自下而上的构建方式保留了所有低能态的完整精细结构细节，

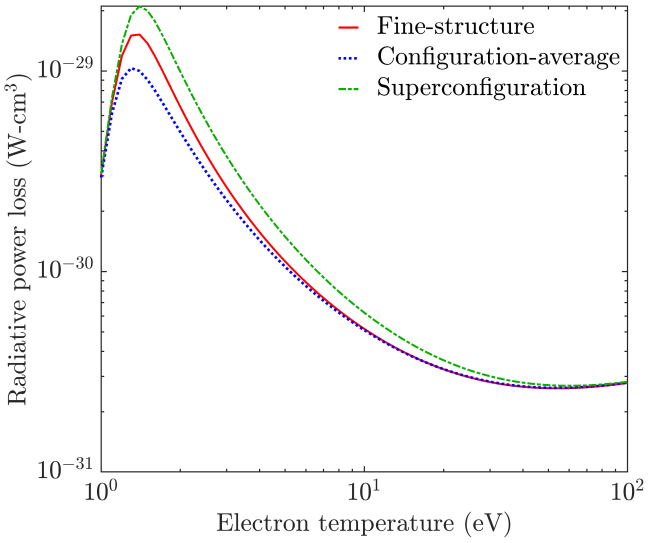

图 1. **氢：** 采用超组态（–·–）、组态平均（···）和精细结构（–）碰撞辐射模型计算的辐射功率损失对比，条件为 $n_e = 10^{12}\text{cm}^{-3}$。值得注意的是，此处展示的超组态和组态平均碰撞辐射模型，是通过对底层精细结构态及其间的原子过程进行统计平均构建的。

这对于描述亚稳态布居、阶梯电离和密度敏感线比至关重要；同时，它还会自适应地缩减状态空间，直至关键等离子体量（例如电荷态分布和辐射功率损失）达到收敛。

图 2 展示了混合碰撞-辐射方案的基本概念。在较低能量处，关键态完全按精细结构分辨；而较高能级则归并为超组态。连续态表示电离通道和自电离态。跃迁分为以下三类：

1. ***S–S* 跃迁**将一个超组态与另一个超组态相连。这些跃迁包括单激发超组态内部的跃迁（例如，(1)(6)、(1)(7)、(1)(8) 等），以及从单激发超组态到双激发或自电离超组态的跃迁（例如，$(2)^2$, (2)(3) 等）。在上一句中，我们用标准形式 $(n_1)^{N_1}(n_2)^{N_2}\ldots(n_\text{m})^{N_\text{m}}$表示超组态，其中 n_m 表示每个轨道壳层的主量子数，而 N_m 表示占据相应壳层的电子数。这种记法对应于对 Layzer

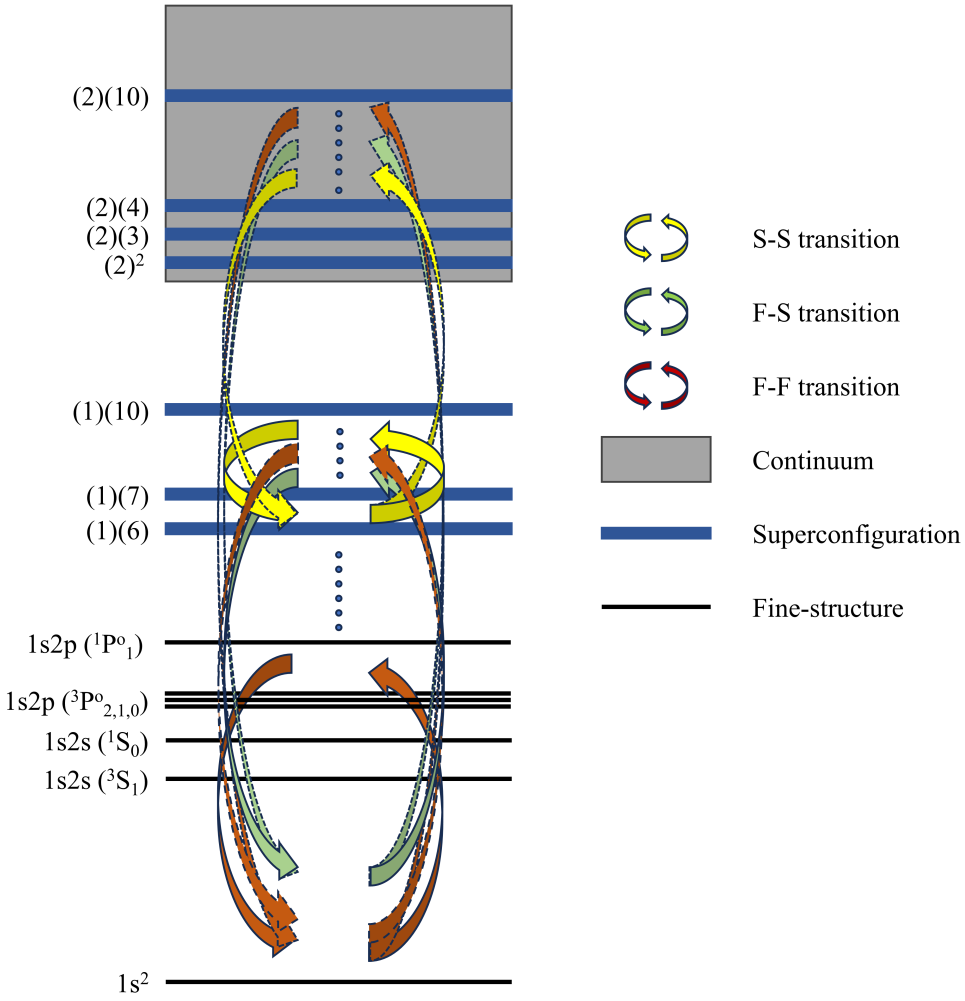

图 2. 氦（或类氦离子）混合方案示意图，展示了精细结构态、超组态态之间的跃迁，以及连接这两个区域的“握手式”耦合。较低能级采用完整的精细结构分辨，而较高能级和类连续态则归并为超组态。

复合组态[33]所产生的所有组态取统计平均。如果省略N_m，则假定$N_m = 1$。其有效截面 σ_{IF}^{SS} 是对一个超组态I内的所有精细结构能级$i \in I$ 以及最终超组态F中的所有能级 $f \in F$ 进行统计平均所得：

$$\sigma_{IF}^{SS} = \sum_{f \in F} \frac{\sum_{i \in I} g_i \sigma_{if}}{\sum_{i \in I} g_i}, \tag{3}$$

其中，g_i 是第i个能级的统计权重，σ_{if} 是第$i \to f$跃迁的精细结构截面。

2. ***F–S* 跃迁** 充当单独分辨的精细结构能级与超组态之间的“握手”。这些跃迁将较低的分辨能级（例如 $1s2s(^3S_1, ^1S_0)$、$1s2p(^3P^o_2,\ 1,\ 0,\ ^1P^o_1)$等）连接到较高的超组态块（例如 (1)(6)、(1)(7)、$(2)^2$, (2)(3)等）。精细结构能级i 跃迁至超组态F 的总截面 σ^{FS}_{iF}通过对f 在F中的所有末态求和 σ_{if} 得到：

$$\sigma^{FS}_{iF} = \sum_{f\in F} \sigma_{if}. \tag{4}$$

3. ***F–F* 跃迁** 完全发生在经过精细结构分辨的能级之间。由于每个精细结构能级都被单独保留，因此只需使用针对这些能级间跃迁计算得到的直接截面（和速率系数）。

如前所述，正向原子过程（包括电子碰撞激发、电子碰撞电离、光电离和俄歇电离）的截面和速率系数，直接取自 FAC 生成的精细结构计算结果。相应逆过程的相关量，即电子碰撞双电离、三体复合、辐射复合和双电子复合，则根据详细平衡关系计算，并统一应用于所有跃迁类别（*F–F*、*F–S* 和 *S–S*）。该方法确保每一对正向和逆向截面或速率系数均通过相应的统计权重和玻尔兹曼因子相互关联，从而维持混合碰撞-辐射模型的热力学一致性。

值得注意的是，在本研究中，混合方案仅专门用于单激发态，而双激发态则采用超组态方法处理。对于聚变相关电子密度，这种选择性处理是合理的，因为双激发态主要具有自电离特性，无法保持显著布居，因此，与低位单激发态相比，对其进行详细的精细结构分辨并不那么重要。

这种部分平均方法，即混合方案，在保留基本物理特性的同时，显著减少了速率方程的数量以及需要求解的速率矩阵规模。重要的是，在诊断和发射光谱中起主导作用的精细结构能级仍保留 *J* 分辨，而超组态方法则捕捉较高能态的集体效应。因此，混合方案兼顾了准确性与计算效率，无需对所有激发能级进行完整的精细结构分辨，即可实现详细的碰撞-辐射建模。

III. 结果与讨论

在本研究中，我们针对氦、锂和铍等离子体物种开发了两种混合碰撞-辐射模型：Hybrid-($n_{\mathrm{valence}}+4$) 和 Hybrid- (n_{valence})。这些模型的主要区别在于保留的精细结构分辨程度。例如，在 Hybrid- ($n_{\mathrm{valence}}+4$) 模型中，精细结构能级保留至 $n_{\mathrm{valence}}+4$，而 $n > n_{\mathrm{valence}}+4$（最高至 $n = 10$）的较高能态则归入超组态。相比之下，Hybrid- (n_{valence}) 模型从 $n_{\mathrm{valence}}+1$ 开始采用超组态平均，以牺牲准确性为代价获得更紧凑的表示。本文针对所研究的全部三种元素，在 Hybrid-($n_{\mathrm{valence}}+4$) 模型中使用的精细结构能级和超组态态的完整列表见表 I。

为验证混合方案，我们将混合碰撞-辐射模型与一种完全精细结构的碰撞-辐射模型进行了基准比较。后者针对每种物种解析了最高至 $n = 10$ 的精细结构能级。表 II 分别列出了精细结构模型和混合模型所包含的能级/态数。随后，我们计算了关键的等离子体性质，包括辐射功率损失和平均电荷态，涵盖电子密度从 10^{12} 到 $10^{17}\ \mathrm{cm}^{-3}$ 以及电子温度从 1 到 $10^{3}\ \mathrm{eV}$ 的范围。以下各节将详细介绍这些比较，并展示所提出的混合碰撞-辐射方法的保真度。

表 I. 混合-($n_{\text{valence}}+4$) 碰撞-辐射模型中采用的类氢、类氦、类锂和类铍原子/离子的精细结构能级与超组态。超组态表示为 $(n_1)^{N_1}(n_2)^{N_2}\ldots(n_{\text{m}})^{N_{\text{m}}}$，其中$n_m$表示各轨道壳层的主量子数，而$N_m$表示占据相应壳层的电子数。

壳层	类氢	类氦	类锂	类铍
		基态和单激发态		
$n=1$	1秒 $(^2S_{1/2})$	$1s^2\ (^1S_0)$	–	–
$n=2$	$2p\ (^2P^{\circ}_{1/2,3/2})$	$1s\ 2s\ (^3S_1,^1S_0)$	$1s^2\ 2s(^2S_{1/2})$	$1s^2\ 2s^2(^1S_0)$
	$2s\ (^2S_{1/2})$	$1s\ 2p\ (^3P^o_{2,1,0},^1P^o_1)$	–	$1s^2\ 2s2p(^3P^o_{0,1,2},^1P^o_1)$
	–	–	–	$1s^2\ 2p^2\ (^1D_2,^3P_{0,1,2})$
	–	–	–	–
$n=3$	$3p\ (^2P^{\circ}_{1/2,3/2})$	$1s\ 3s(^3S_1,^1S_0)$	$1s^2\ 3s(^2S_{1/2})$	$1s^2\ 2s\ 3s\ (^3S_1,^1S_0)$
	$3s\ (^2S_{1/2})$	$s\ p\ (^3P^o_0,\ ,\ ,\ ^1P^o_1)$	$1s^2\ 3p(^2P^o_{1/2,\ 3/2})$	$1s^2\ 2s\ 3p\ (^3P^o_{0,1,2},^1P^o_1)$
	$3d\ (^2D^{\circ}_{3/2,5/2})$	$1s\ 3d(^3D_{1,2,3},^1D_2)$	$1s^2\ 3d(^2D_{3/2,5/2})$	$1s^2\ 2s\ 3d\ (^3D_{1,2,3},^1D_2)$
$n=4$	$4p\ (^2P^{\circ}_{1/2,\ 3/2})$	$1s\ 4s(^3S_1,^1S_0)$	$1s^2\ 4s(^2S_{1/2})$	$1s^2\ 2s\ 4s\ (^3S_1,^1S_0)$
	$4s\ \ (^2S_{1/2})$	$1s\ 4p(^3P^o_{2,1,0},^1P^o_1)$	$1s^2\ 4p(^2P^o_{1/2,\ 3/2})$	$1s^2\ 2s\ 4p\ (^3P^o_{0,1,2},^1P^o_1)$
	$4天(^2天^{\circ}_{3/2,\ 5/2})$	$1s\ 4d(^3D_{1,2,3},^1D_2)$	$1s^2\ 4d(^2D_{3/2,5/2})$	$1s^2\ 2s\ 4d\ (^3D_{1,2,3},^1D_2)$
	$4f\ (^2F^{\circ}_{5/2,7/2})$	$1s\ 4f(^3F^o_{2,3,4},^1F^o_3)$	$1s^2\ 4f(^2F^o_{5/2,7/2})$	$1s^2\ 2s\ 4f\ (^3F^o_{2,3,4},^1F^o_3)$
$n=5$	$5段落\ (^2P^{\circ}_{1/2,\ 3/2})$	$1秒\ 5秒(^3S_1,^1S_0)$	$1s^2\ 5s(^2S_{1/2})$	$1s^2\ 2s\ 5s\ (^3S_1,^1S_0)$
	$5s\ (^2S_{1/2})$	$1s\ 5p(^3P^o_{2,1,0},^1P^o_1)$	$1s^2\ 5p(^2P^o_{1/2,\ 3/2})$	$1s^2\ 2s\ 5p\ (^3P^o_{0,1,2},^1P^o_1)$
	$5d\ (^2D^{\circ}_{3/2,\ 5/2})$	$1s\ 5d(^3D_{3,2,1},^1D_2)$	$1s^2\ 5d(^2D_{3/2,5/2})$	$1s^2\ 2s\ 5d\ (^3D_{1,2,3},^1D_2)$
	$5f\ (^2F^{\circ}_{5/2,7/2})$	$1s\ 5f(^3F^o_{4,3,2},^1F^o_3)$	$1s^2\ 5f(^2F^o_{5/2,7/2})$	$1s^2\ 2s\ 5f\ (^3F^o_{2,3,4},^1F^o_3)$
	$5f\ (^2G^{\circ}_{7/2,9/2})$	$1s\ 5g(^3G_{5,4,3},^1G_4)$	$1s^2\ 5g(^2G^o_{7/2,9/2})$	$1s^2\ 2s\ 5g\ (^3G_{3,4,5},^1G_4)$

$n=6$	(6)	(1) (6)	$1s^2\ 6s(^2S_{1/2})$	$1s^2\ 2s\ 6s\ (^3S_1,^1S_0)$
	–	–	$1s^2\ 6p(^2P^o_{1/2,3/2})$	$1s^2\ 2s\ 6p(^3P^o_{0,1,2},^1P^o_1)$
	–	–	$1s^2\ 6d(^2D_{3/2,5/2})$	1秒^2 2秒 6天 ($^3D_{1,2,3},^1D_2$)
	–	–	$1s^2\ 6f(^2F^o_{5/2,7/2})$	$1s^2\ 2s\ 6f\ (^3F^o_{2,3,4},^1F^o_3)$
	–	–	$1s^2\ 6g(^2G^o_{7/2,9/2})$	1秒^2 2秒 6克 ($^3G_{3,4,5},^1G_4$)
	–	–	$1s^2\ 6h(^2H^o_{9/2,11/2})$	1秒^2 2秒 6时 ($^3H_{4,5,6},^1H^o_5$)
$n=7$	(7)	(1) (7)	$(1)^2$ (7)	$(1)^2$ (2) (7)
$n=8$	(8)	(1) (8)	$(1)^2$ (8)	$(1)^2$ (2) (8)
$n=9$	(9)	(1) (9)	$(1)^2$ (9)	$(1)^2$ (2) (9)
$n=10$	(10)	(1) (10)	$(1)^2$ (10)	$(1)^2$ (2) (10)
		双激发态		
$n=2$	–	$(2)^2$	(1) $(2)^2$	(1) $(2)^3$
$n=3$	–	(2) (3)	(1) (2) (3)	(1) $(2)^2$(3), $(1)^2$ $(3)^2$
$n=4$	–	(2) (4)	(1) (2) (4)	(1) $(2)^2$(4), $(1)^2$ (3) (4)
$n=5$	–	(2) (5)	(1) (2) (5)	(1) $(2)^2$(5), $(1)^2$ (3) (5)
$n=6$	–	(2) (6)	(1) (2) (6)	(1) $(2)^2$(6), $(1)^2$ (3) (6)
$n=7$	–	(2) (7)	(1) (2) (7)	(1) $(2)^2$(7), $(1)^2$ (3) (7)
$n=8$	–	(2) (8)	(1) (2) (8)	(1) $(2)^2$(8), $(1)^2$ (3) (8)
$n=9$	–	(2) (9)	(1) (2) (9)	(1) $(2)^2$(9), $(1)^2$ (3) (9)
$n=10$	–	(2) (10)	(1) (2) (10)	(1) $(2)^2$(10), $(1)^2$ (3) (10)

表 II. 不同元素在精细结构、混合-($n_{\text{valence}}+4$) 和混合-(n_{valence}) 碰撞-辐射模型中的能级/态数量比较。

	精细结构	混合-(n_{valence}+4)	混合-（n_{valence}）
氦	1046	94	30
锂	2585	142	50
铍	9790	413	85

A. 氦

氦在聚变等离子体中发挥着核心作用，不仅是氘氚反应的主要聚变副产物，也是实验等离子体运行中常用的等离子体调控和诊断气体。在碰撞-辐射建模中，复合和电离过程对于氦灰提取或再循环[34] 尤为重要。氦的双电子结构产生了丰富的原子动力学特性，包括显著的电子-电子关联、伴随长寿命亚稳态的单重态-三重态分裂，以及大量会发生俄歇电离并促成双电子复合的双激发态。

图 3 展示了在聚变相关电子密度 $10^{14}\ \mathrm{cm}^{-3}$ 下，辐射功率损失、平均电荷态和有效电荷态的对比；该密度具有代表性的边缘等离子体和偏滤器等离子体条件。两种混合模型在大部分温度范围内都与精细结构基准相符；然而，Hybrid-(n_{valence}) 模型在较低温度下出现了显著偏差。在 5–50 eV 的辐射峰值窗口内，Hybrid-($n_{\mathrm{valence}}+4$) 模型的所有量与精细结构结果的偏差始终不超过 2%，而简化模型在 3–4 eV 附近的误差高达 35%。此温度范围对应于从中性氦向单电离氦的跃迁；能级分辨率有限会导致自发辐射衰变率出现平均化误差，进而使预测的辐射功率损失产生偏差。

在电子温度高于 20 eV 时，混合模型均收敛至精细结构基准值的 1% 以内。这一现象反映出，在此温度范围内等离子体已基本电离，低能级精细结构态对辐射平衡的贡献变得微不足道。

为进一步支持这些发现，我们加入了奇偶图，如图 4 所示，直观地比较混合模型的预测结果与精细结构基准。在这些图中，每个点代表两个模型中的一对数值；若完全一致，该点应落在对角线上。聚集在对角线附近的点表明，Hybrid-($n_{\mathrm{valence}}+4$) 模型能够以很高的精度再现精细结构结果，而明显的偏差则揭示了简化的 Hybrid-(n_{valence}) 模型的局限性。在较低电子密度下，这些差异变得更加显著，因为亚稳态不会被碰撞猝灭，因此可能保持较大的布居数。亚稳态较长的寿命及其对密度敏感的跃迁路径，使原子动力学对能级分辨率高度敏感。由于简化的 Hybrid-(n_{valence}) 模型未能充分捕捉这些亚稳态的贡献，因此表现出

在此状态下，与基准精细结构结果相比存在更大的偏差。

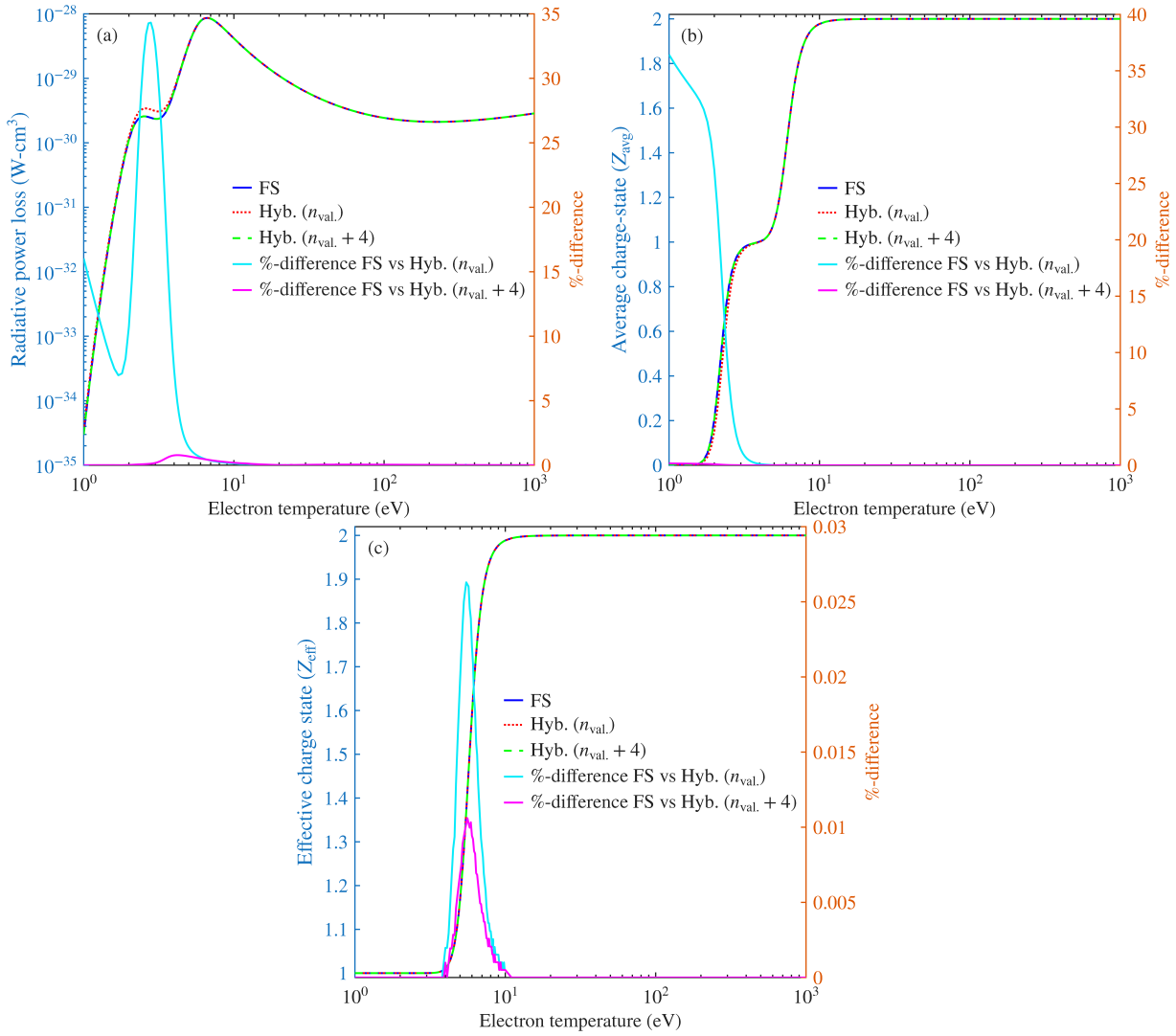

图 3。**氮：** 比较精细结构碰撞-辐射模型与两个混合模型 Hybrid-（n_{valence}）和 Hybrid-（$n_{\text{valence}}+4$）在 $n_e = 10^{14}\,\text{cm}^{-3}$ 条件下得到的（a）辐射功率损失、（b）平均电荷态和（c）有效电荷态。右侧坐标轴显示了每个混合模型相对于精细结构结果的百分比偏差。此处，“val.” = 表示价电子，“Hyb.” = 表示混合。

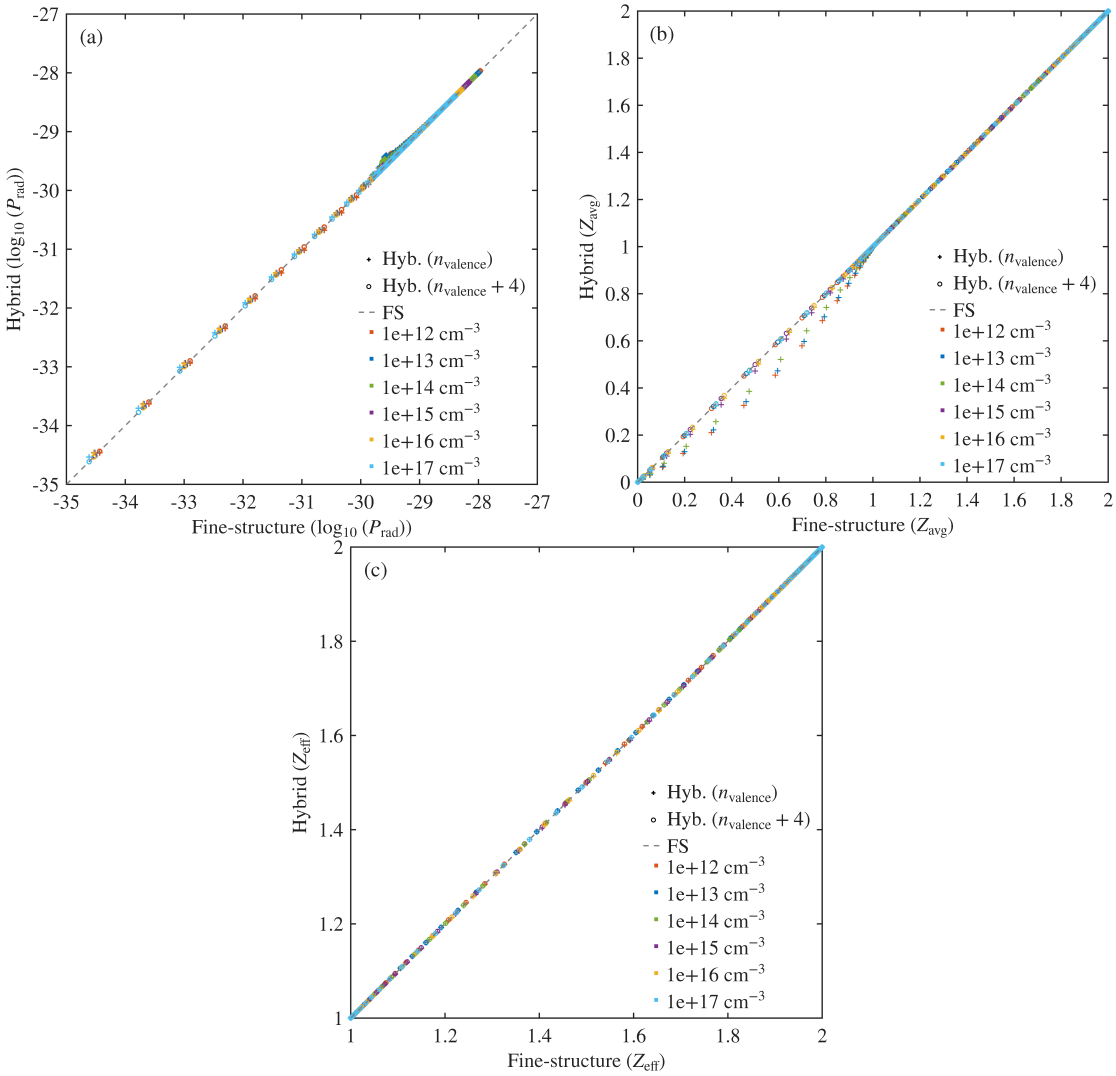

图 4. **氦：** 奇偶图比较了在电子密度从 10^{12} 到 10^{17} cm^{-3}的范围内，混合-($n_{\rm valence}$)模型和混合-($n_{\rm valence}+4$)模型预测的 (a) 辐射功率损失，$P_{\rm rad}$；(b) 平均电荷态，$Z_{\rm avg}$；以及 (c) 有效电荷态，$Z_{\rm eff}$，与精细结构碰撞-辐射模型的对比。虚线对角线表示完全吻合（$y=x$）；点越接近该线，表示与精细结构基准模型吻合得越好。

B. 锂

在聚变等离子体中，锂既可作为蒸发形成的壁面调理层[35]引入，也可作为液态金属等离子体面对部件的候选材料[36], ，因此在许多装置中，锂作为受控杂质和诊断物种进入等离子体。锂有三个电子，其原子物理比氦更为丰富：低能开壳层结构、众多双激发态，以及密集的自电离和双电子复合共振，为原子动力学和辐射发射提供了更多途径。

图 5 展示了在 $n_e = 10^{14}$ cm^{-3} 条件下对三种关键等离子体性质的全面比较，揭示出锂与氦截然不同的行为。辐射功率损失呈现三个明显的极大值：低温峰位于 $T_e \approx 1$ eV 附近，与中性锂线辐射有关；尖锐的主峰位于 $T_e \approx 8$ eV 附近，源于强烈的 Li^{+} 辐射；较宽的极大值则出现在 $T_e \approx 25$ eV 左右，对应于 Li^{2+}。这一三峰结构反映了锂三个电子的逐级电离。混合-($n_{\text{valence}} + 4$) 模型以极高的精度捕捉到了这一复杂的辐射结构，能够紧密再现尖锐的主峰和较宽的次级极大值。然而，混合-(n_{valence}) 模型显著低估了次级辐射峰，表明在混合处理过程中保留较高能态的精细结构细节至关重要。

电离平衡提出了更严峻的考验：它呈现出三个清晰分离的平台，分别对应连续的 $Li \rightarrow Li^{+} \rightarrow Li^{2+} \rightarrow Li^{3+}$ 电离阶段。每次跃迁都发生在相对狭窄的温度范围内，导致平均电荷态曲线急剧上升。Hybrid-($n_{\text{valence}} + 4$) 模型在整个温度范围内以 1% 以内的精度重现了这些电离跃迁，高保真地捕捉了平台区域和急剧跃迁区。然而，简化混合模型（n_{valence}）在关键的 4–20 eV 区间内系统性地低估了电荷态；在该区间，$Li^{+} \rightarrow Li^{2+}$ 跃迁主导等离子体动力学。这种行为源于三电子系统中电离与复合过程之间复杂的相互作用，在该系统中，单激发态的精细化会显著改变电离平衡。此外，尽管两个模型对双激发态的处理完全相同，还需考虑的另一重要因素是：双激发组态的自电离与自发衰变之间的竞争，可能会因它们与单激发态的耦合方式不同而改变电离平衡。

有效电荷态在 4–20 eV 电子温度下呈现出相似的结构特征——

特性。在这一快速变化区域内，扩展混合模型始终保持稳健的性能，偏差低于1%；相比之下，简化混合模型显示出30–35%的差异。

图6中的奇偶图定量证实，与氦相比，锂需要精细得多的分辨率才能达到相当的精度。尽管 Hybrid-($n_{\mathrm{valence}} + 4$) 的结果在整个参数空间内都保持近似对角线排列，但简化混合模型呈现出明显的散布，尤其是在辐射功率损失预测方面。这些结果表明，对于锂等三电子体系，扩展混合方法对于实现可靠的等离子体建模至关重要。

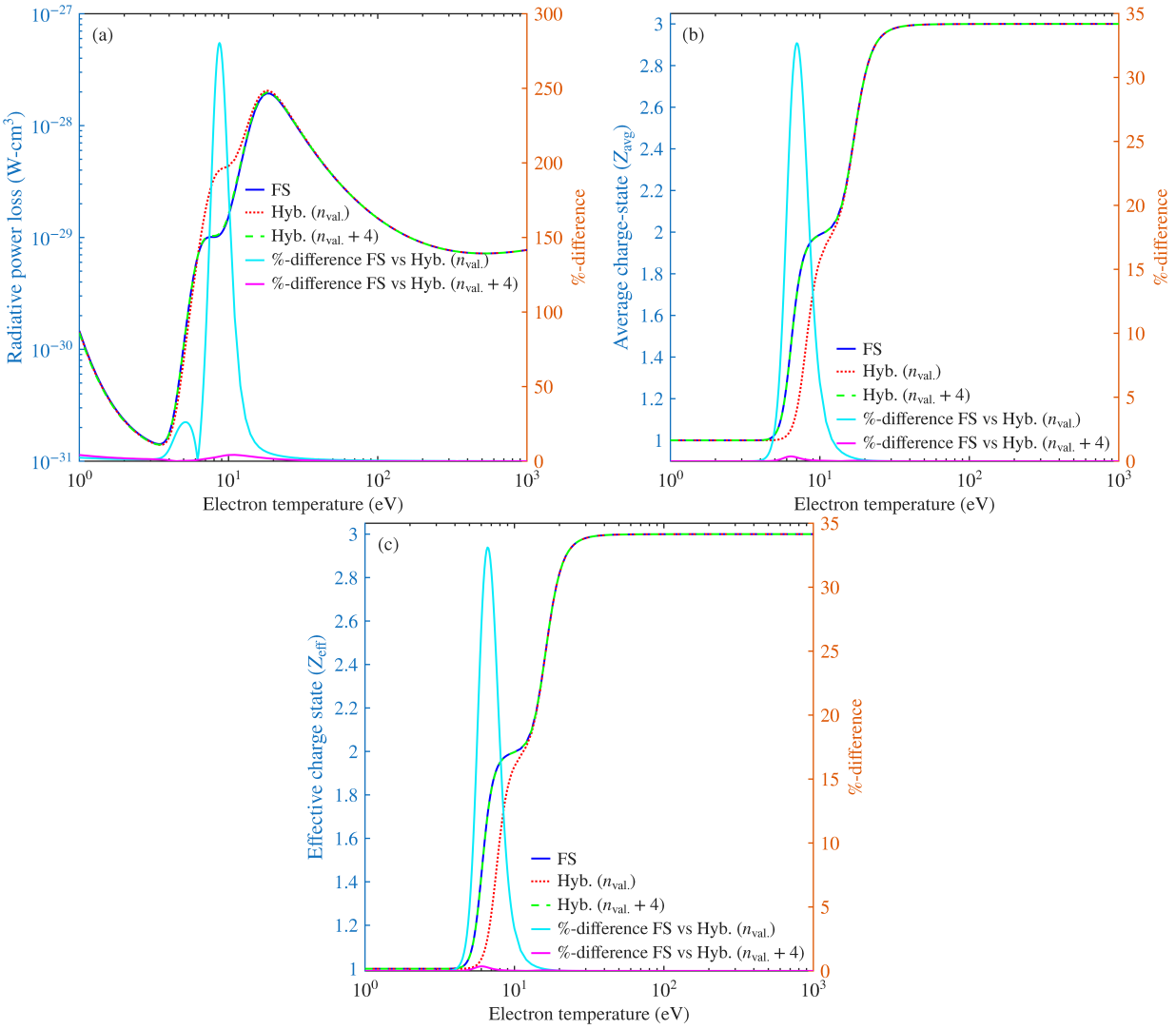

图 5. **锂：**比较精细结构碰撞-辐射模型与两个混合模型 Hybrid-（n_{valence}）和 Hybrid-（$n_{\text{valence}}+4$）得到的 (a) 辐射功率损失、(b) 平均电荷态和 (c) 有效电荷态。右侧纵轴表示各混合模型相对于精细结构结果的百分比偏差。此处，“val.” = 表示价电子，“Hyb.” =表示混合。

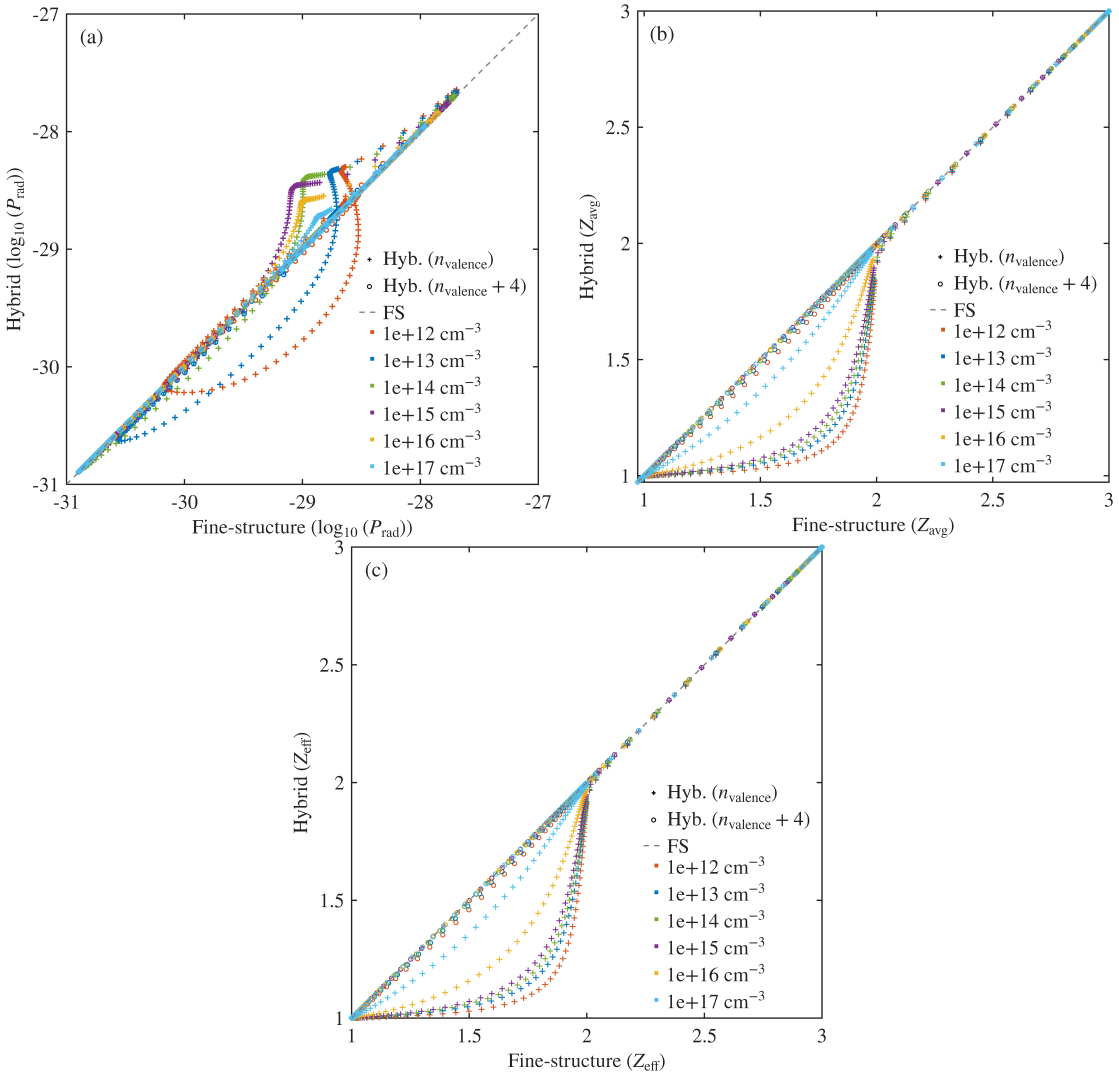

图6。**锂：** 奇偶图比较了精细结构碰撞-辐射模型与混合-(n_{valence})和混合-($n_{\mathrm{valence}}+4$)模型的预测结果，比较指标包括：(a) 辐射功率损失，P_{rad}；(b) 平均电荷态，Z_{avg}；以及 (c) 有效电荷态，Z_{eff}。电子密度范围为 10^{12} 至 10^{17} cm^{-3}。虚线对角线表示完全吻合（$y=x$）；越靠近该直线的点，表示与精细结构基准模型的吻合程度越高。

C. 铍

铍是聚变等离子体研究中另一个有用的基准元素，因为它曾作为等离子体面对材料用于 JET[37] 类似国际热核聚变实验堆第一壁，因此也是一种重要杂质，必须对其有所了解，才能解读 JET 等离子体运行方案。尽管 ITER 更新后的设计已选择采用全钨第一壁，取代最初的铍第一壁设计，但铍仍是一种值得关注的第一壁材料，因为它的原子序数低，而且是优良的中子倍增材料。其四电子结构（Be I: $1s^2 2s^2$）引入了多电子关联、双激发态和双电子复合过程，使其原子动力学比锂更复杂；不过，采用精细结构描述仍可处理，因此可用作基准，评估当前 FCR 代码中混合模型的物理保真度。

在$n_e = 10^{14}$ cm^{-3}下，图 7 显示，在所研究的三种元素中，铍在所有等离子体性质方面都表现出最复杂的行为。其辐射功率损失呈现丰富的多峰结构，主峰、次峰和第三峰分别出现在约 1–2 eV、15–20 eV 和 30–40 eV 处。这一结构源于 Be 逐级电离为 Be^{+}、Be^{2+}、Be^{3+} 和 Be^{4+}，每个电离阶段都会产生独特的光谱特征，并由不同的原子跃迁主导。

Hybrid-($n_{\mathrm{valence}} + 4$) 模型能够再现这一复杂的辐射结构，在所有温度范围和峰值处的偏差均低于 15%。考虑到计算量大幅降低，这一精度尤为显著：能级数量从精细结构模型中的近一万个减少到扩展混合模型中的 413 个。Hybrid-(n_{valence}) 模型未能捕捉到重要的精细结构贡献，在第一个辐射峰处的偏差约为 10%，之后的峰值处则分别增至约 30% 和 100%，这凸显了在多电子系统中为较高能态保留精细结构细节的重要性。

电荷态演化呈现出四个明显的电离平台，分别对应不同的铍离子。与锂相比，这些平台之间的跃迁更为陡峭，反映出电子组态束缚更紧、电离势梯度更大。Hybrid-($n_{\mathrm{valence}} + 4$) 模型能够准确捕捉这些电离动力学，在整个温度范围内的偏差均低于 2%。简化混合模型在关键跃迁区域的误差较大，尤其是在 Be^{+} to Be^{2+} 跃迁期间，多体效应主导粒子数动力学。

图 8 中的奇偶图进一步证实了这些精度趋势。扩展混合

模型在所有温度和密度下都紧密聚集在对角线附近，表明其与完整精细结构基准高度吻合。简化混合模型的散布明显更宽，反映出当平均处理从过于接近基态组态的位置开始时，重要的精细结构选择性会丧失。

除精度方面的考量外，混合碰撞-辐射框架的一个重要优势在于其计算效率。以铍为例，在扩展混合模型（Hybrid-（$n_{\mathrm{valence}}+4$））中，精细结构能级从 9,790 个减少到 413 个，并在简化版本（Hybrid-（n_{valence}））中进一步减少到 85 个，从而直接降低了求解碰撞辐射速率方程所需的计算量。由于线性代数步骤的计算规模近似按 $\mathcal{O}(N^3)$ 增长，系统规模的缩减会显著减少求解器运行时间。

此外，速率矩阵的构建也带来了同样重要的收益。所有速率系数均通过对麦克斯韦电子分布进行积分，根据相关原子过程的基础截面生成。随着可用能级数量增加，这一步的计算成本会迅速增长，因为能级之间的跃迁总数会随能级集合规模的增大而快速增加。因此，将活性态数量从近万个减少到数百个，相应地减少了需要计算和组装的跃迁数量。这一缩减使得在本研究所考察的所有等离子体密度下，速率矩阵生成的计算成本均显著降低。

一项直接的计算基准测试展示了这一改进的幅度。对于铍而言，扩展混合模型使总计算时间平均缩短约二十五倍；总计算时间包括速率矩阵构建和线性系统求解，涵盖了本研究所考察的所有电子密度。在锂和氦的情形下也观察到了相当的缩减，平均计算效率分别提高约十八倍和六倍。这些结果表明，混合框架能够在多种等离子体物种中持续实现显著的效率提升。

对于重离子，混合框架的计算优势预计会更加显著。对这类物种进行详细的精细结构碰撞-辐射建模，可能涉及数十万个能级以及数量极其庞大的能级间跃迁，使得直接计算越来越不切实际。因此，该方法在氦、锂和铍上的可扩展性表明，混合方法非常适合将碰撞-辐射建模扩展到更高 Z 杂质；在控制计算成本的同时保持精细结构的精确度，对于实现准确的等离子体诊断和综合聚变建模至关重要。

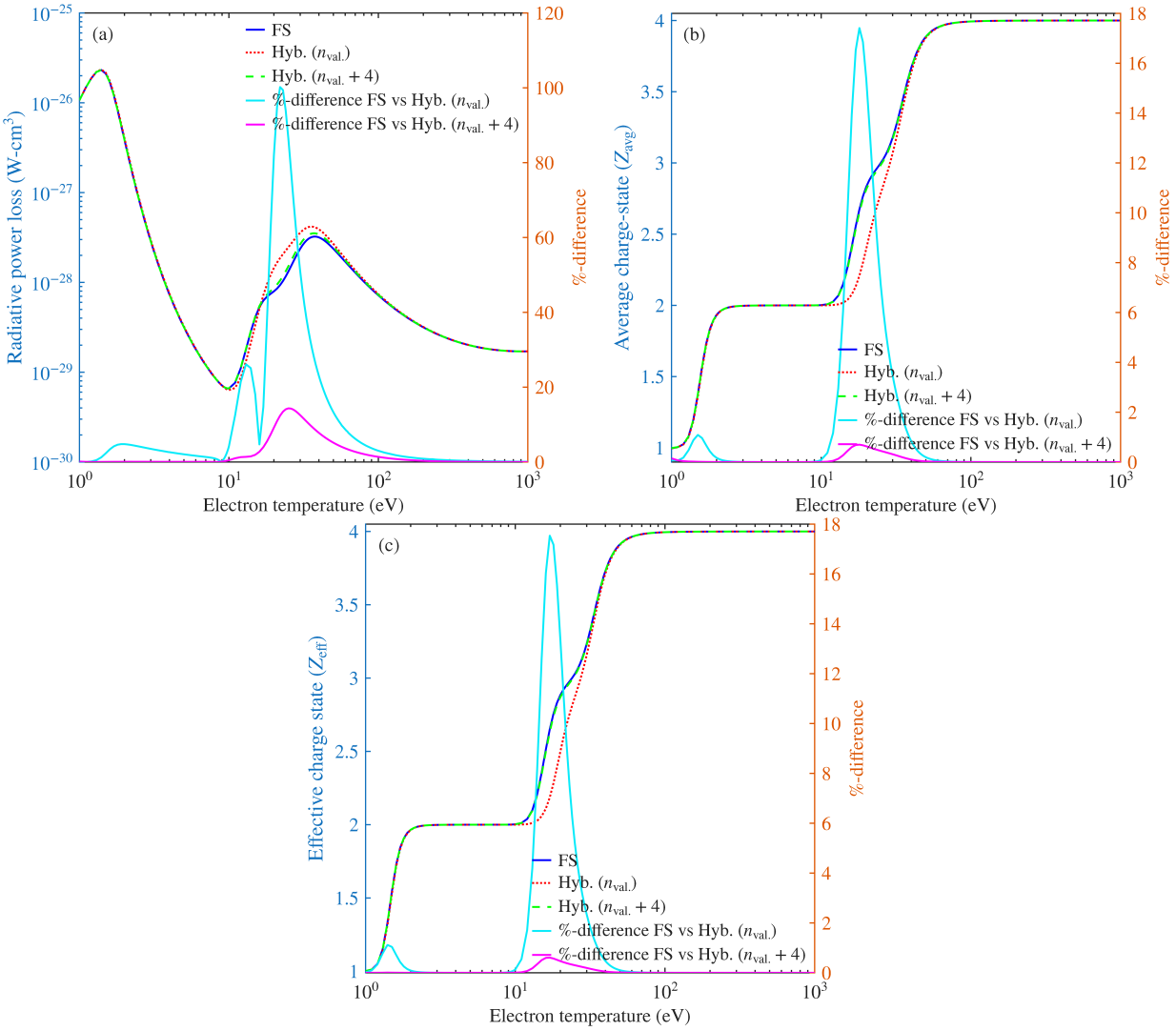

图 7. **铍：** 精细结构碰撞-辐射模型与两种混合模型 Hybrid-(n_{valence}) 和 Hybrid- ($n_{\text{valence}}+4$) 在 $n_e = 10^{14}$ cm^{-3} 条件下得到的 (a) 辐射功率损失、(b) 平均电荷态和 (c) 有效电荷态的比较。右侧纵轴显示各混合模型相对于精细结构结果的百分比偏差。此处，“val.” = 表示价电子，“Hyb.” =表示混合。

IV. 结论

在本研究中，我们开发并验证了混合碰撞-辐射模型，将精细结构分辨率与超组态平均相结合，在准确性与计算效率之间实现了实用的平衡。我们考察了两种变体：Hybrid-(n_{valence}) 和 Hybrid-($n_{\text{valence}}+4$)。第一种模型保留了截至n_{valence} 的详细精细结构能级，第二种则保留至$n_{\text{valence}}+4$；而较高能态（最高至$n = 10$）则通过统计方法平均为超组态

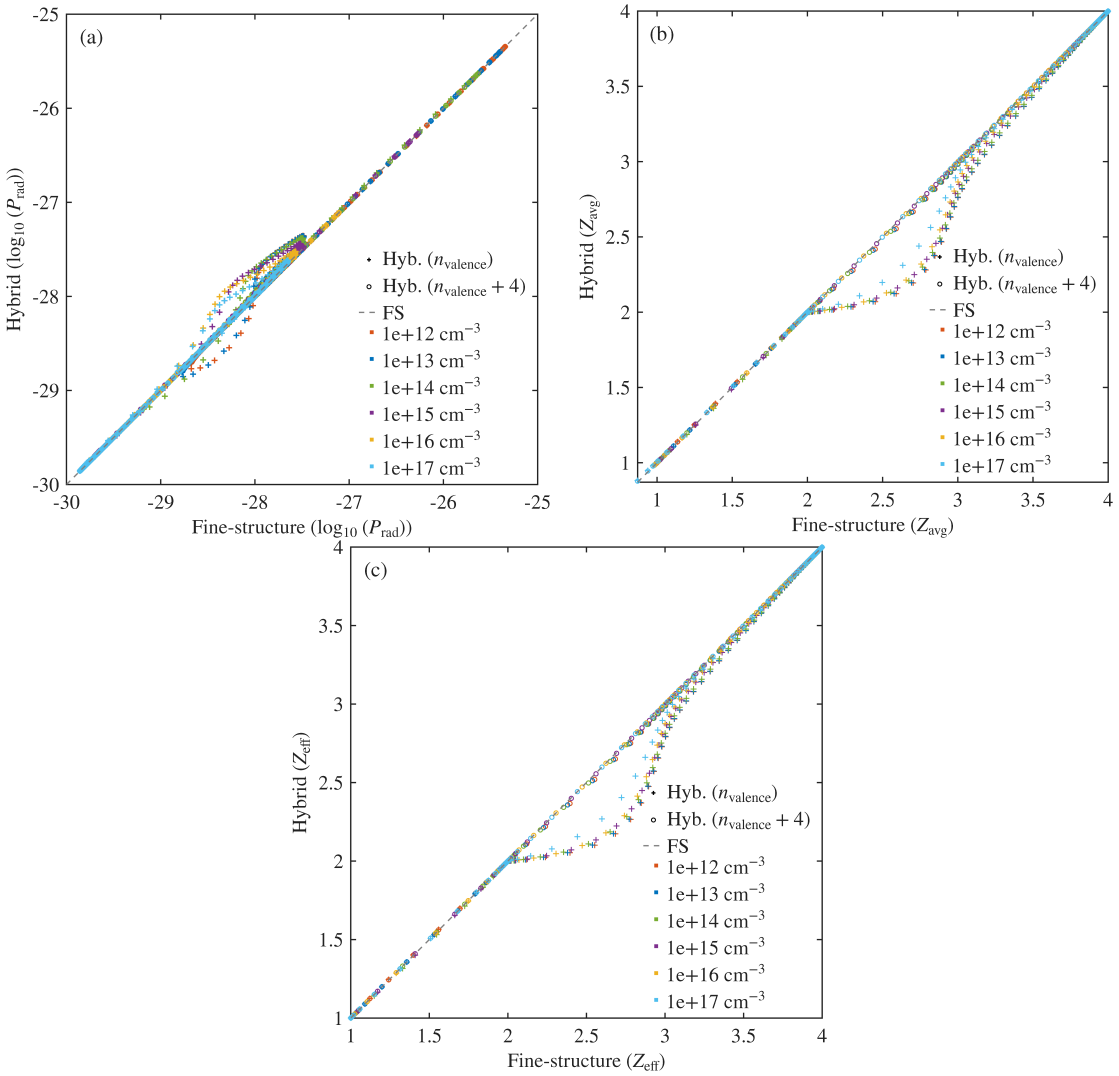

图 8. **铍：** 奇偶图比较了精细结构碰撞-辐射模型与 Hybrid-($n_{\rm valence}$) 和 Hybrid-($n_{\rm valence}+4$) 模型在电子密度从 10^{12} 到 10^{17} cm^{-3}范围内预测的 (a) 辐射功率损失，$P_{\rm rad}$，(b) 平均电荷态，$Z^{\rm avg}$，以及 (c) 有效电荷态，$Z_{\rm eff}$。虚线对角线表示完全吻合（$y=x$）；点越接近该直线，表示与精细结构基准模型的吻合度越高。

组态态。与氦、锂和铍的完整精细结构碰撞-辐射模型相比，Hybrid-($n_{\rm valence}$)能够再现等离子体可观测量的总体趋势，但会引入显著误差，尤其是在辐射主导区间；而Hybrid-($n_{\rm valence}+4$)与精细结构基准的吻合度高得多，误差更少，且相较于完整精细结构模型，计算成本显著降低。这些结果表明，混合碰撞-辐射框架是一种通用且可扩展的等离子体建模策略，可供用户

以平衡计算成本与所需的原子结构保真度。该方法非常适用于聚变、天体物理和实验室等离子体，在这些场景中，必须在不增加计算开销的情况下保持预测准确性。未来的研究将致力于扩展并评估混合方法在更高 Z 离子和非麦克斯韦电子分布方面的应用，从而拓宽其在更复杂等离子体环境中的适用范围。

V. 致谢

本研究由美国能源部通过聚变能源科学办公室的聚变理论计划，以及聚变能源科学办公室与先进科学计算办公室联合开展的 SciDAC 托卡马克破裂模拟合作项目共同资助。相关工作在洛斯阿拉莫斯国家实验室（LANL）开展，合同编号为 89233218CNA000001。C.J.F、M.C.Z 和 J.C 特别感谢洛斯阿拉莫斯国家实验室（LANL）的 ASC PEM 原子物理项目。LANL 由 Triad National Security, LLC 代表美国能源部国家核安全管理局运营（合同编号：89233218CNA000001）。本研究使用了美国能源部科学办公室用户设施国家能源研究科学计算中心的资源；该中心由美国能源部科学办公室资助，合同编号为 DE-AC02-05CH11231。本研究使用的 NERSC 资源由项目编号 FES-ERCAP0032298 提供。

参考文献

[1]Y. Ralchenko，载于等离子体碰撞-辐射建模的现代方法 （施普林格，纽约，2016年）。[2]D. Reiter、M. Baeva、O. Marchuk 和 R. K. Janev，载于*AIP*会议论文集 （美国物理联合会，2005年），第771卷，第3–12页。[3]M. Goto 和 K. Sawada，《定量光谱学与辐射传递杂志》**137**，23（2014年）。[4]I. Golovkin、J. MacFarlane、P. Woodruff、J. Bailey、G. Rochau、K. Peterson、T. Mehlhorn 和 R. Mancini，《定量光谱学与辐射传递杂志》**99**，199（2006年）。[5]H. A. Scott，载于等离子体碰撞-辐射建模的现代方法（施普林格，2016 年），第 81–104 页。

混合碰撞-辐射建模：实现高保真原子动力学[6]A. K. Pradhan 和 S. N. Nahar，《原子天体物理学与光谱学》（剑桥大学出版社，2011年）。[7]P. Greenland，《伦敦皇家学会学报 A辑：数学、物理与工程科学》457，1821（2001年）。[8]V. Donnelly、M. Malyshev、M. Schabel、A. Kornblit、W. Tai、I. Herman 和 N. Fuller，《等离子体源科学与技术》11，A26（2002年）。[9]H. Akatsuka，《物理学进展：X》4，1592707（2019年）。[10]H.-K. Chung、M. H. Chen、W. L. Morgan、Y. Ralchenko 和 R. W. Lee，《高能量密度物理》1，3（2005年）。[11]C. J. Fontes、J. Colgan、H. Zhang 和 J. Abdallah Jr，《定量光谱学与辐射传递杂志》99，175（2006年）。[12]S. Hansen、J. Bauche、C. Bauche-Arnoult 和 M. Gu，《高能量密度物理》3，109（2007年）。[13] C. J. Fontes、J. Colgan 和 J. Abdallah Jr.，载于《等离子体碰撞-辐射建模的现代方法》，第15页，（施普林格，纽约，2016年）。[14]Z. Guo 和 X.-Z. Tang，《物理评论快报》109，135005（2012年）。[15]X.-Z. Tang 和 Z. Guo，《等离子体物理》23，083503（2016年）。[16]Y. Zhang、J. Li 和 X. Tang，《科学报告》14，23448（2024年）。[17]H. Mao、Y. Zhang 和 X. Tang，arXiv预印本 arXiv:2311.09396（2023年）。[18]C. J. McDevitt、X.-Z. Tang 和 Z. Guo，《等离子体物理》24，112702（2017年）。[19]C. J. McDevitt、Z. Guo 和 X.-Z. Tang，《等离子体物理与受控聚变》61，054008（2019年）。[20]N. A. Garland、H.-K. Chung、C. J. Fontes、M. C. Zammit、J. Colgan、T. Elder、C. J. McDevitt、T. M. Wildey 和 X.-Z. Tang，《等离子体物理》27，040702（2020年）。[21]D. Laurie，《计算数学》66，1133（1997年）。[22]M. F. Gu，《加拿大物理学杂志》86，675（2008年）。[23]Y.-K. Kim，《物理评论A辑》64，032713（2001年）。[24]V. Jonauskas，《原子数据与核数据表》135，101363（2020年）。[25]V. Jonauskas，《天文学与天体物理学》659，A11（2022年）。[26]K. Bartschat，《计算机物理通讯》114，168（1998年）。[27]I. Bray、I. B. Abdurakhmanov、J. J. Bailey、A. W. Bray、D. V. Fursa、A. S. Kadyrov、C. M. Rawlins、J. S. Savage、A. T. Stelbovics 和 M. C. Zammit，《物理学杂志B辑：原子物理》，

用于高保真原子动力学的混合碰撞-辐射建模 分子与光学物理**50**，202001（2017年）。[28] C. J. Fontes、H. L. Zhang、J. Abdallah Jr、R. E. H. Clark、D. P. Kilcrease、J. Colgan、R. T. Cunningham、P. Hakel、N. H. Magee 和 M. E. Sherrill，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**48**，144014（2015年）。[29]H. Summers 和 M. O’ Mullane，《原子数据与分析结构 （施普林格柏林海德堡，柏林，海德堡，2005年），第399–413页。[30]J. Abdallah Jr、M. E. Sherrill、D. P. Kilcrease、C. J. Fontes、H. Zhang 和 J. Oelgoetz，《高能量密度物理》**5**，204（2009年）。[31]Y. V. Ralchenko 和 Y. Maron，《定量光谱学与辐射传递杂志》**71**，609（2001年）。[32]R. Clark 和 J. J. Abdallah，《硅和铁的辐射功率损失比较计算》（国际原子能机构，2003年）。[33]D. Layzer，《物理学年鉴》**8**，271（1959年）。[34]D. Reiter 和 S. Wiesen，《聚变科学与技术》**45**，261–270（2004年）。[35]R. Kaita，《等离子体物理与受控聚变》**61**，113001（2019年）。[36]S. Mirnov，《核材料杂志》**390-391**，876（2009年）。[37]M. Rubel、A. Widdowson、J. Grzonka、E. Fortuna-Zalesna、S. Moon、P. Petersson、N. Ashikawa、N. Asakura、D. Hamaguchi、Y. Hatano 等，《聚变工程与设计》**136**，579–586（2018年）。