

## 一种计算非平衡等离子体中粒子能级布居的简化方法

何新 江涛 高城 张振福 杨俊波

## A simplified method of calculating electronic energy level populations in nonequilibrium plasmas

He Xin Jiang Tao Gao Cheng Zhang Zhen-Fu Yang Jun-Bo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 145202 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20202119

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202119>

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

#### 非平衡感应耦合等离子体流场与电磁场作用机理的数值模拟

Numerical investigation on interaction mechanisms between flow field and electromagnetic field for nonequilibrium inductively coupled plasma

物理学报. 2019, 68(18): 185202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190865>

#### 等离子体屏蔽效应对Ar<sup>16+</sup>基态和激发态能级的影响

Influence of plasma shielding effect on ground state and excited state energies of Ar<sup>16+</sup>

物理学报. 2019, 68(2): 023102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181915>

#### 电子的非广延分布对等离子体鞘层中二次电子发射的影响

Effects of  $q$ -nonextensive distribution of electrons on secondary electron emission in plasma sheath

物理学报. 2019, 68(18): 185204 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190225>

#### 高功率微波作用下等离子体中的雪崩效应研究

Avalanche effect in plasma under high-power microwave irradiation

物理学报. 2017, 66(19): 195202 <https://doi.org/10.7498/aps.66.195202>

#### 黑腔中等离子体相互作用的流体力学现象观测

Observation of hydrodynamic phenomena of plasma interaction in hohlraums

物理学报. 2018, 67(23): 235201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181391>

#### 非磁化冷等离子体柱中的模式辐射特性分析

Analysis of mode radiation characteristics in a non-magnetized cold plasma column

物理学报. 2017, 66(5): 055201 <https://doi.org/10.7498/aps.66.055201>

# 一种计算非平衡等离子体中粒子能级布居的简化方法<sup>\*</sup>

何新<sup>1)</sup> 江涛<sup>2)</sup> 高城<sup>1)†</sup> 张振福<sup>1)</sup> 杨俊波<sup>1)</sup>

1) (国防科技大学文理学院, 长沙 410073)

2) (中国空气动力研究与发展中心计算空气动力研究所, 绵阳 621000)

(2020 年 12 月 14 日收到; 2021 年 2 月 7 日收到修改稿)

获得粒子能级布居是研究非平衡等离子体辐射性质的一个重要方面. 对于复杂三维等离子体, 采用细致碰撞辐射模型虽然精确, 但计算耗费大. 本文提出了一种束缚态特征温度法, 能够快速计算得到非平衡等离子体中的粒子能级布居. 对非平衡氦等离子体算例的研究表明, 本文方法是有效的, 在等离子体非平衡程度不太高时与碰撞辐射模型符合较好. 在计算效率上, 本文方法比碰撞辐射模型至少提高了 3000 倍, 可极大节约计算资源和成本, 在工程计算中有重要实际意义.

**关键词:** 非平衡, 等离子体, 能级布居

**PACS:** 52.25.-b, 52.25.Kn, 05.10.-a

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202119

## 1 引言

在天体物理、X 射线激光物理和约束聚变等领域中<sup>[1]</sup>, 常常需要掌握等离子体的辐射特性, 进而研究其中辐射的输运与分配<sup>[2]</sup>. 为了获得辐射参数, 必须知道等离子体中粒子的能级布居.

对局域热动平衡 (local thermodynamic equilibrium, LTE) 等离子体, 通过求解 Saha 方程可方便地得到粒子能级布居<sup>[3]</sup>. 然而, 很多情况下的等离子体处在非局域热动平衡状态 (non-LTE, NLTE)<sup>[4]</sup>. 计算 NLTE 等离子体中的粒子能级布居是辐射特性研究必须面对的问题.

碰撞辐射 (collisional-radiative, CR) 模型是常用的 NLTE 等离子体的计算模型, 该模型考虑等离子体中所有碰撞和辐射等微观原子过程, 建立能级布居速率方程组并进行求解<sup>[5]</sup>. 根据原子参数

的精密程度, 研究者发展了基于不同层次的 CR 模型, 如平均原子模型<sup>[6–9]</sup>、超组态模型<sup>[10–14]</sup>、细致组态模型<sup>[15–21]</sup>和细致能级模型<sup>[22,23]</sup>等. 一般说来, 细致能级模型因为考虑了不同电荷态离子的能级结构, 计算精度最高, 但是计算耗费大; 而超组态模型把大量能量相近的精细能级近似处理成一个“能级”, 虽节省了计算时间, 但降低了计算精度<sup>[24–26]</sup>. 因此研究者们提出了一些兼顾计算精度和计算时间的 CR 模型和方法<sup>[27–29]</sup>. 例如 Hansen 等<sup>[27]</sup>使用混合了细致能级模型和超组态模型的方法获得原子参数和能级布居; Bauche 等<sup>[29]</sup>在超组态模型中引入“有效温度”的概念, 能够方便获得相应能级上的粒子占据数. 虽然 CR 模型的种类很多<sup>[26]</sup>, 但很多时候为了准确模拟 NLTE 等离子体辐射性质, 需要选取足够多数量的量子态, 使得速率方程组规模很大. 大规模的速率方程组求解复杂, 计算量大, 通常要借助高性能计算平台. 在三

<sup>\*</sup> 国家数值风洞工程 (批准号: NNW2019ZT3-B07) 和国家自然科学基金 (批准号: 12074430) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: [gaocheng@nudt.edu.cn](mailto:gaocheng@nudt.edu.cn)

维尺度、参数梯度大的等离子体工程计算中, CR 模型虽然精度高, 但难于实际应用. 因此, 研究能够保证一定精度同时低成本、高效率的计算方法, 一直是研究者不断追求的目标, 也具有重要且实际的意义.

本文提出了一种束缚态特征温度简化方法, 用于 NLTE 等离子体中粒子能级布居的快速、简便计算. 以 5 种条件下的 NLTE 氦等离子体为例, 与 CR 模型的计算结果进行对比, 分析讨论该方法的准确度和效率.

## 2 束缚态特征温度法

本文不考虑处于完全热非平衡态的等离子体. 在一般情况下的 NLTE 等离子体中, 可认为自由电子服从某一自由电子温度  $T_e$  的麦克斯韦速度分布 [2]. 考察 NLTE 等离子体中原子序号为  $A$  的  $z$  价粒子  $A^{z+}$  ( $0 \leq z \leq A$ ,  $z = 0$  表示原子), 设其电离能为  $I^z$ , 如图 1 所示.

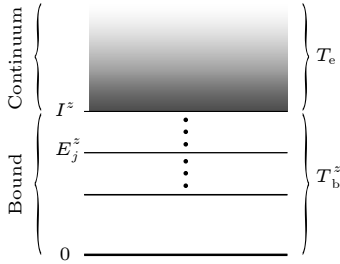


图 1  $A^{z+}$  的束缚态及连续态  
Fig. 1. Bound and continuum states of  $A^{z+}$ .

一方面,  $I^z$  能级可看作  $A^{z+}$  的束缚态. 引入  $A^{z+}$  的束缚态特征温度  $T_b^z$ , 即假设  $A^{z+}$  各束缚态上的占据数服从温度为  $T_b^z$  的 Boltzmann 分布, 则  $I^z$  能级上的“粒子数”  $N_I^z$  满足:

$$\frac{N_I^z}{N^z} = \frac{g_I^z}{Q^z(T_b^z)} \exp\left(-\frac{I^z}{kT_b^z}\right), \quad (1)$$

其中  $N^z$  为  $A^{z+}$  粒子数,  $g_I^z$  为  $I^z$  能级的简并度,  $k$  为 Boltzmann 常数,  $Q^z(T_b^z) = \sum_j g_j^z \exp\left[-\frac{E_j^z}{kT_b^z}\right]$  为  $A^{z+}$  在特征温度  $T_b^z$  下的配分函数 ( $E_j^z$  和  $g_j^z$  分别为  $A^{z+}$  第  $j$  束缚态的能量和简并度).

另一方面,  $I^z$  能级上的粒子可看作由处于基态的  $A^{(z+1)+}$  与速度为零的自由电子构成. 由于自由电子服从  $T_e$  下的麦克斯韦速度分布, 则  $N_I^z$  还

满足 [30]:

$$\frac{N_0^{z+1} N_e}{N_I^z} = \frac{2g_0^{z+1}}{g_I^z} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2}\right)^{3/2}, \quad (2)$$

其中  $N_0^{z+1}$  和  $g_0^{z+1}$  分别为  $A^{(z+1)+}$  基态的占据数和简并度,  $N_e$  为自由电子数,  $m_e$  为自由电子质量,  $h$  为 Planck 常数. 类似地, 引入  $A^{(z+1)+}$  的束缚态特征温度  $T_b^{z+1}$ , (2) 式可转化为

$$\frac{N^{z+1} N_e}{N_I^z} = \frac{2Q^{z+1}(T_b^{z+1})}{g_I^z} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2}\right)^{3/2}, \quad (3)$$

其中  $N^{z+1}$  为  $A^{(z+1)+}$  粒子数,  $Q^{z+1}(T_b^{z+1})$  为  $A^{(z+1)+}$  在特征温度  $T_b^{z+1}$  下的配分函数.

联立 (1) 式和 (3) 式, 有

$$\frac{N^{z+1} N_e}{N^z} = \frac{2Q^{z+1}(T_b^{z+1})}{Q^z(T_b^z)} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2}\right)^{3/2} \times \exp\left(-\frac{I^z}{kT_b^z}\right), \quad (4)$$

由此可计算出  $T_b^z$ . 进而, 根据 Boltzmann 公式  $N_j^z = N^z g_j^z \exp[-E_j^z/(kT_b^z)]/Q^z(T_b^z)$ , 可得到  $A^{z+}$  粒子的各能级占据数.

在应用上述方法时, 除需要粒子的能级参数外, 还需要各价粒子数密度、自由电子数密度和自由电子温度作为输入参数 (来自于实验或计算). 具体计算过程中, 可直接令  $T_b^A = T_e$  (因为  $z = A$  对应于粒子完全电离), 然后按照“倒序”依次求解出  $T_b^{A-1}$ ,  $T_b^{A-2}$ ,  $\dots$ ,  $T_b^0$ , 详细计算流程如图 2 所示. 实际上, 总存在某个电离度范围  $p \leq z \leq q$ , 不在该电离度范围的粒子丰度相对很小. 此时, 可近

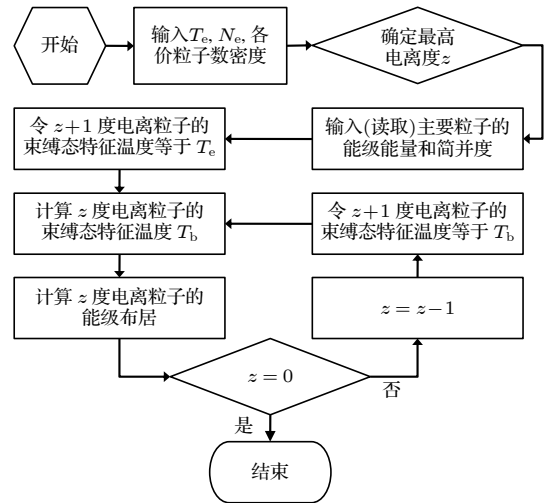


图 2 计算流程图

Fig. 2. Calculation flowchart.

似认为  $T_b^{q+1} = T_e (q+1 \leq A)$ , 然后依次求解出  $T_b^q$ ,  $T_b^{q-1}, \dots, T_b^p$ , 进而计算主要粒子的能级布居.

值得一提的是, 对于 LTE 等离子体, 必然有  $T_b^z = T_e (0 \leq z \leq A)$ , 那么 (4) 式自然过渡为 LTE 条件下的 Saha 方程<sup>[30]</sup>.

### 3 算例与讨论

表 1 列出了 5 种条件的 NLTE 氖 (Ne) 等离子体, 其中 e 代表自由电子. 为了便于将本文计算的能级布居与 CR 模型结果进行直接对比, 表中 Ne 粒子百分数、自由电子 (e) 数密度均采用了与 CR 模型相同的数据<sup>[22]</sup>. 另外, 表中未列出丰度小于  $10^{-6}$  的粒子. 算例 1—算例 3 主要研究 Ne 核总数密度相同、 $T_e$  不同的情况; 算例 4 和算例 5 分别与算例 2 和算例 3 对应, 主要研究  $T_e$  相同、Ne 核总数密度不同的情况.

表 1 算例参数  
Table 1. Cell parameters.

	算例1	算例2	算例3	算例4	算例5
$kT_e / \text{eV}$	5	15	40	15	40
Ne核总数密度/ $\text{cm}^{-3}$	$10^{18}$	$10^{18}$	$10^{18}$	$10^{20}$	$10^{20}$
Ne 粒子数含量/%	0.0258				
Ne <sup>+</sup> 粒子数含量/%	5.2017				
Ne <sup>2+</sup> 粒子数含量/%	88.6853	0.0015		5.0406	
Ne <sup>3+</sup> 粒子数含量/%	6.0863	0.4202		38.9713	0.0002
Ne <sup>4+</sup> 粒子数含量/%	0.0008	19.4618		48.9205	0.0299
Ne <sup>5+</sup> 粒子数含量/%		67.8883	0.0037	6.9899	1.0996
Ne <sup>6+</sup> 粒子数含量/%		12.1407	0.6767	0.0777	15.7779
Ne <sup>7+</sup> 粒子数含量/%		0.0874	20.1261		48.7610
Ne <sup>8+</sup> 粒子数含量/%			79.1935		34.3313
Ne <sup>9+</sup> 粒子数含量/%					
Ne <sup>10+</sup> 粒子数含量/%					
e 数含量/ $(10^{18} \text{ cm}^{-3})$	2.01	4.92	7.79	351.00	712.00

根据 (4) 式, 计算能级布居还用到各价 Ne 粒子的电离能 (见表 2). 等离子体环境中, 由于屏蔽效应, 原子 (或离子) 的电离能相比于孤立原子会下降. 表 2 中的数据由计算而得 (等离子体条件:  $kT_e$  为 40 eV, Ne 核数密度为  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ). 在本文所研究的等离子体条件下, 电离能下降值变化不大, 因此忽略不同条件 (自由电子温度、核总数密度) 对 Ne 粒子电离能的影响.

表 2 Ne 原子及离子电离能  
Table 2. Ionization energy of neon atom and ions.

原子(离子)	电离能/eV
Ne	19.441
Ne <sup>+</sup>	40.565
Ne <sup>2+</sup>	63.007
Ne <sup>3+</sup>	93.588
Ne <sup>4+</sup>	123.924
Ne <sup>5+</sup>	157.561
Ne <sup>6+</sup>	201.788
Ne <sup>7+</sup>	230.156
Ne <sup>8+</sup>	1183.642
Ne <sup>9+</sup>	1345.217

在下文各图中, 能级布居均是非简并的, 标有 “Boltzmann” 和 “Saha” 的数据分别由  $T_e$  下的 Boltzmann 公式和 Saha 方程计算而得:

$$\frac{N_j^z}{g_j^z} = \frac{N^z}{Q^z(T_e)} \exp\left(-\frac{E_j^z}{kT_e}\right), \quad 0 \leq z \leq 10, \quad (5)$$

$$\frac{N_j^z}{g_j^z} = \frac{N^{z+1} N_e}{2Q^{z+1}(T_e)} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e kT_e}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{I^z - E_j^z}{kT_e}\right), \quad 0 \leq z \leq 10. \quad (6)$$

为反映等离子体的非平衡程度, 引入 (5) 式和 (6) 式的比值  $\alpha$  (对同种粒子的任意能级均相等). 显然, 对平衡等离子体,  $\alpha = 1$ ; 反之,  $\alpha$  偏离 1. 为评估本文计算结果与 CR 模型的符合程度, 对各能级计算出二者的比值  $\delta$  ( $\delta = 1$  表示完全符合).

图 3 为算例 1 条件下本文计算的能级布居与 CR 模型结果的对比. 图中,  $1.00 < \alpha \leq 2.13$ , 可知等离子体是弱非平衡的. 如图 3(a), (b), (d), (e), 对于 Ne, Ne<sup>+</sup>, Ne<sup>3+</sup> 和 Ne<sup>4+</sup>,  $\delta$  与 1 的平均偏差不大于 10%, 说明本文计算的能级布居与 CR 模型符合很好. 如图 3(c) 所示, 对于 Ne<sup>2+</sup>,  $\delta$  与 1 的平均偏差稍大 (-31%), 这可能主要是由于 Ne<sup>2+</sup> 的电离能数据存在误差.

图 4 为算例 2 条件下能级布居结果对比. 图中,  $1.71 \leq \alpha \leq 30.08$ , 较算例 1 有所增大, 可知此条件下等离子体的非平衡程度提高. 对于各价 Ne 离子 (除图 4(d) 中的 Ne<sup>5+</sup>),  $\delta$  与 1 的平均偏差都在 17% 以内, 说明此条件下计算出的能级布居与 CR 模型符合较好.

图 5 为算例 3 条件下能级布居结果对比. 此条件下,  $7.63 \leq \alpha \leq 40484$ , 说明非平衡程度进一步增大.

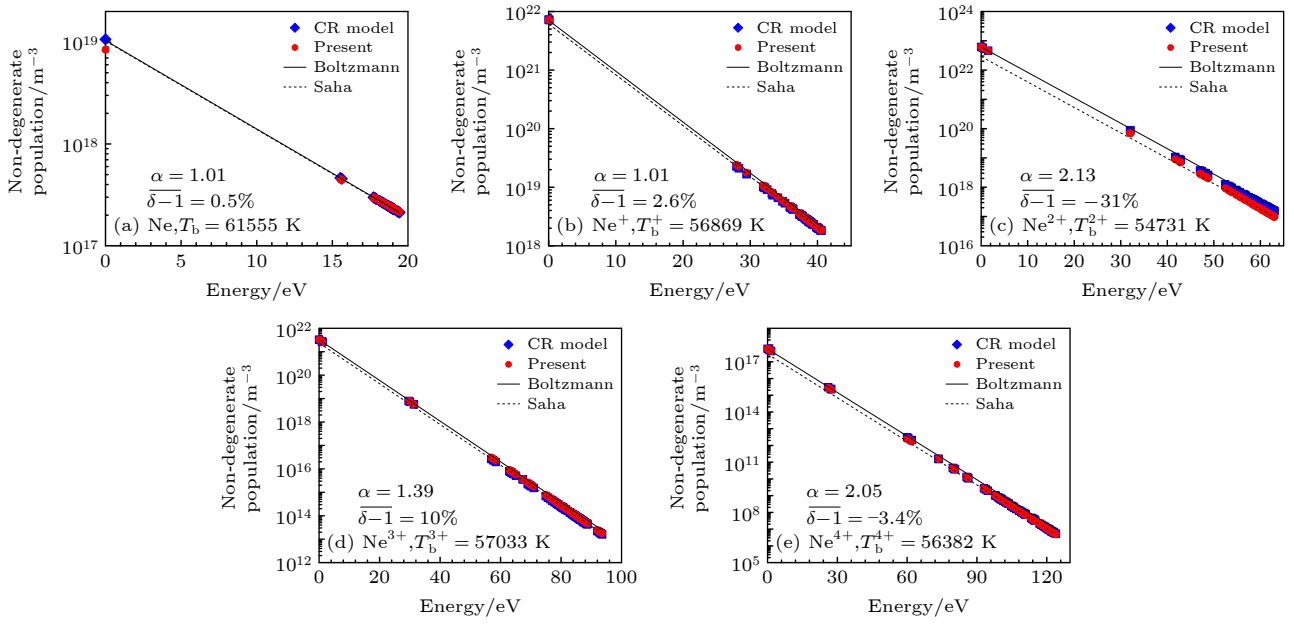


图3 算例1的非简并能级布居

Fig. 3. Non-degenerate electronic level populations for Case 1.

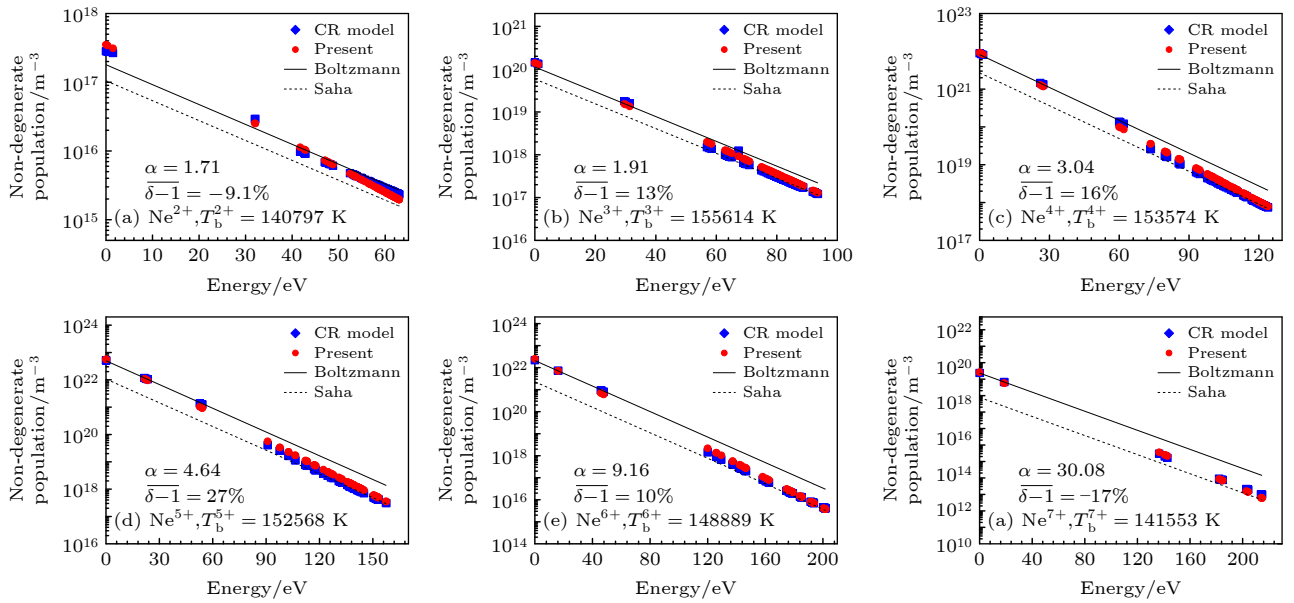


图4 算例2的非简并能级布居

Fig. 4. Non-degenerate electronic level populations for Case 2.

如图 5(a) 所示, 对于 Ne<sup>5+</sup>,  $\delta$  与 1 的平均偏差为 38%. 如图 5(b)—图 5(d), 对于 Ne<sup>6+</sup>, Ne<sup>7+</sup> 和 Ne<sup>8+</sup>,  $\delta$  与 1 的平均偏差不大于 20%. 结果表明, 此条件下本文计算得到的能级布居与 CR 模型偏离不大.

对比图 3—图 5 可知, 在 Ne 核总数密度为  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  条件下, 对于弱非平衡态, 本文计算的能级布居与 CR 模型符合很好; 随着非平衡程度增大, 本文计算结果与 CR 模型之间逐渐产生偏离.

图 6 为算例 4 条件下能级布居计算结果. 对于各价 Ne 离子,  $\alpha$  均接近 1, 说明等离子体处于近平衡态. 此条件较算例 2 的非平衡程度降低, 主要归因于 Ne 核总数密度增大. 图 6 中,  $\delta$  与 1 的平均偏差不超过 10%, 说明计算结果与 CR 模型符合很好. 对比图 6 与图 4 可知, 在  $kT_e = 15 \text{ eV}$  条件下, 若非平衡程度提高, 则本文得到的能级布居与 CR 模型的偏离增大, 这与图 3—图 5 反映的现象类似.

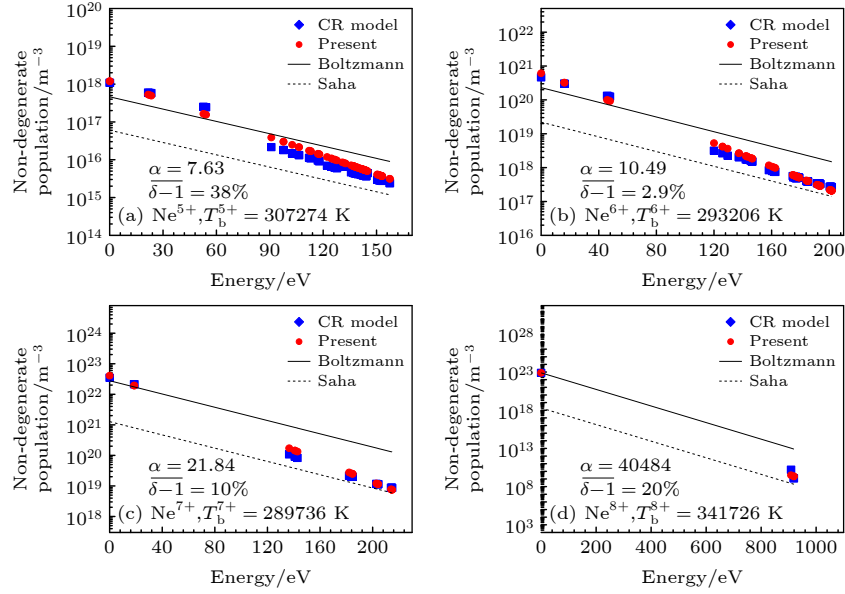


图 5 算例 3 的非简并能级布居

Fig. 5. Non-degenerate electronic level populations for Case 3.

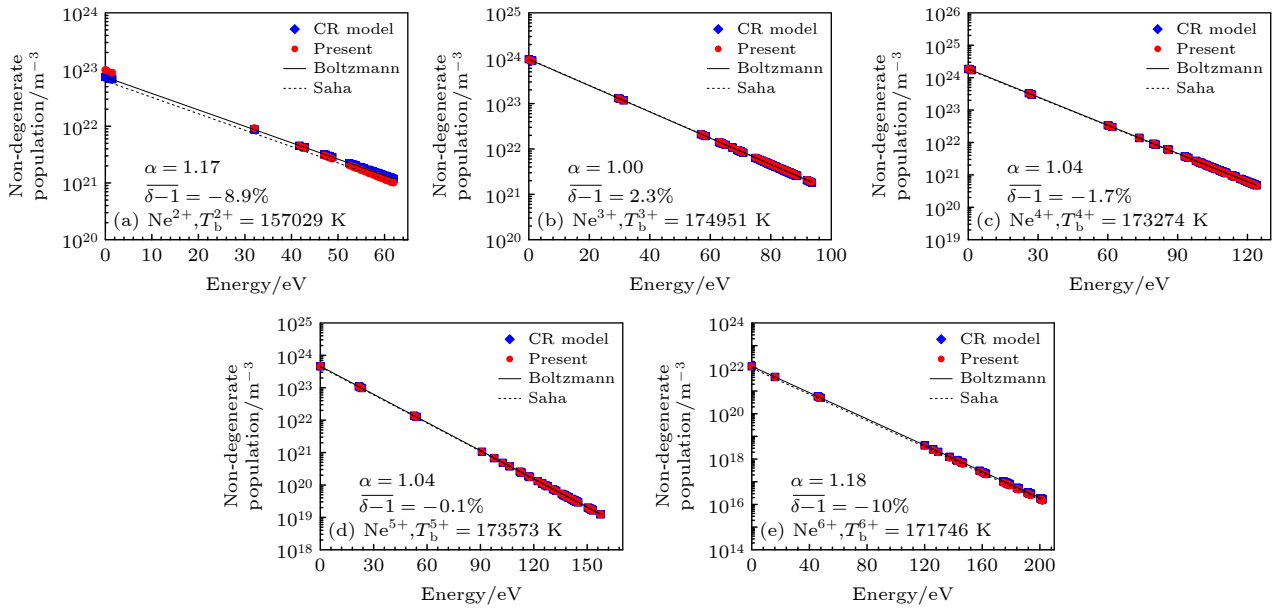


图 6 算例 4 的非简并能级布居

Fig. 6. Non-degenerate electronic level populations for Case 4.

图 7 为算例 5 条件下能级布居计算结果. 相比于算例 3, 由于 Ne 核总数密度增加, 等离子体非平衡程度降低 ( $1.03 \leq \alpha \leq 218$ ). 对于图 7(e) 中的  $\text{Ne}^{7+}$ ,  $\delta$  与 1 的平均偏差稍大 ( $-13.5\%$ ); 对于图 7 中其他各价 Ne 离子,  $\delta$  与 1 的平均偏差都不大于  $7.8\%$ . 因此, 此条件下得到的能级布居与 CR 模型符合较好. 对比图 7 与图 5 发现, 现象与  $kT_e = 15 \text{ eV}$  时类似.

综上, 若以 CR 模型作为参照, 本文提出的束缚态特征温度法的计算准确度与等离子体非平衡程度有关. 当等离子体非平衡程度较弱 ( $1.00 < \alpha \leq 2.13$ ) 时, 本文方法与 CR 模型非常符合 (平均偏差基本在  $10\%$  以内); 随着非平衡程度的增大 ( $2.13 < \alpha \leq 218$ ), 与 CR 模型逐渐产生偏差 (平均偏差基本在  $30\%$  以内); 若非平衡程度不太高 ( $\alpha \leq 40484$ ), 与 CR 模型符合较好 (平均偏差不超过  $38\%$ ).

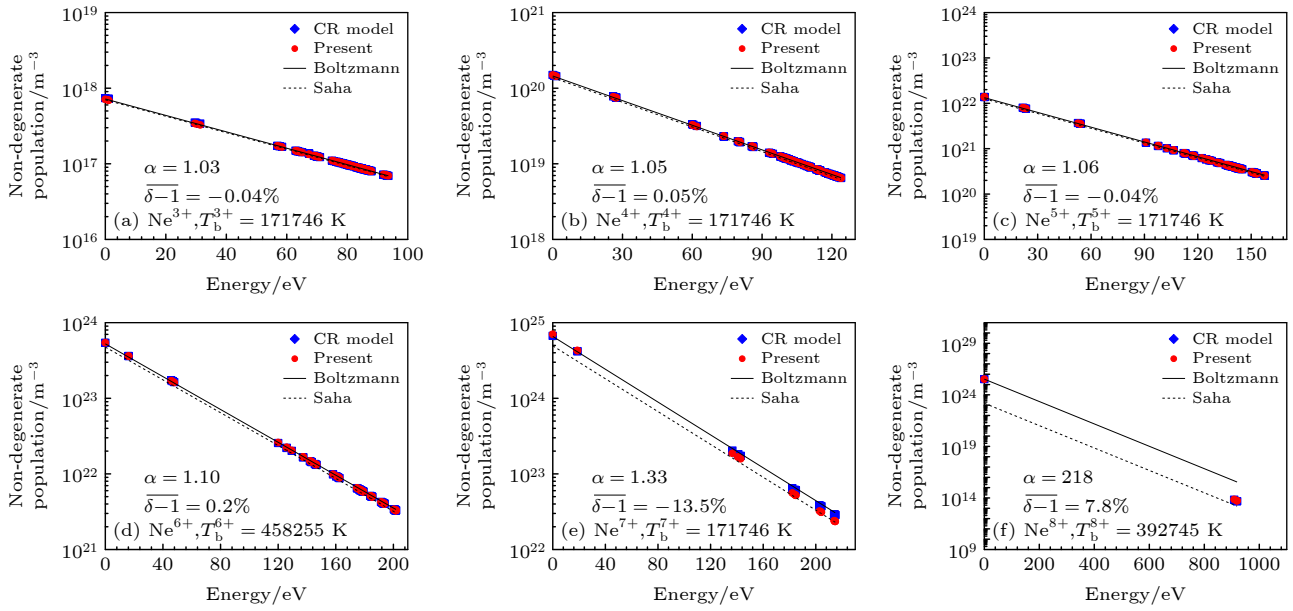


图 7 算例 5 的非简并能级布居  
Fig. 7. Non-degenerate electronic level populations for Case 5.

表 3 计算耗费对比  
Table 3. A comparison of calculation cost.

	程序语言	计算平台	CPU	总耗时
CR模型	Fortran	IBM服务器	Intel Xeon E5649: 6核2.53 GHz	约24 h
本文方法	Matlab	Thinkpad笔记本电脑	Intel Core i5-3320 M: 2核2.60 GHz	约28 s

本文方法也适用于其他等离子体中的原子及离子. 如果原子及离子来源于不同种核, 可分别对每种核应用上述方法. 由于不需求解能级布居速率方程组, 可极大节约计算资源. 表 3 给出了 5 个算例总耗时对比, 忽略程序语言效率及计算平台性能的差别, 本文方法比 CR 模型至少提高了 3000 倍. 在误差允许范围内, 这将在参数梯度大、复杂三维非平衡等离子体的工程计算中产生巨大效益.

## 4 结 论

提出了一种用于计算非平衡等离子体中原子及离子能级布居的简化方法. 以几种条件 ( $5 \text{ eV} \leq kT_e \leq 40 \text{ eV}$ ,  $10^{18} \text{ cm}^{-3} \leq \text{核数密度} \leq 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ) 的非平衡 Ne 等离子体为例, 计算研究了粒子的能级布居, 并与 CR 模型进行了对比. 结果表明: 1) 该方法是有效的, 当等离子体非平衡程度不太高时与 CR 模型符合较好; 2) 计算速度比 CR 模型至少提高了 3000 倍, 可大大节约计算成本, 对于复杂三维等离子体计算非常有用.

## 参考文献

- [1] Rogers F J, Iglesias C A 1994 *Science* **263** 50
- [2] Gao C 2011 *Ph. D. Dissertation* (Changsha: National University of Defense Technology) (in Chinese) [高城 2011 博士学位论文 (长沙: 国防科技大学)]
- [3] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley and Los Angeles: University of California Press) p2
- [4] Wu Z 2000 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: China Academy of Engineering Physics) (in Chinese) [吴泽清 2000 博士学位论文 (北京: 中国工程物理研究院)]
- [5] Surzhikov S T 2012 *J. Heat Transfer* **134** 031002
- [6] Itoh M, Yabe T, Kiyokawa S 1987 *Phys. Rev. A* **35** 233
- [7] Bel'kov S A, Gasparian P D, Dolgolyova G V 1997 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **58** 471
- [8] Novikov V G, Zakharov S V 2003 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81** 339
- [9] Wang M S, Liu L T, Han X Y, Li J M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2371 (in Chinese) [王民盛, 刘凌涛, 韩小英, 李家明 2006 物理学报 **55** 2371]
- [10] Peyrusse O, Bauche-Arnoult C, Bauche J 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** L137
- [11] Bar-Shalom A, Oreg J, Klapisch M 2000 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **65** 43
- [12] Peyrusse O 2001 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71** 571
- [13] Bauche J, Bauche-Arnoult C, Peyrusse O, Bachelier A, Gauthier J C 2003 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81**

- 47
- [14] Peyrusse O 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 4303
- [15] Hauschildt P H 1993 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **50** 301
- [16] Duston D, Clark R W, Davis J, Apruzese J P 1983 *Phys. Rev. A* **27** 1441
- [17] Lee R W, Whiten B L, Stout R E 1984 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **32** 91
- [18] Tang J W, Hang D Z, Yi Y G 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7769 (in Chinese) [唐京武, 黄笃之, 易有根 2010 物理学报 **59** 7769]
- [19] Lee Y T 1987 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **38** 131
- [20] Abdallah Jr J, Sherrill M E 2008 *High Energy Density Phys.* **4** 124
- [21] Fontes C J, Abdallah Jr J, Clark R E H, Kilcrease D P 2000 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **65** 223
- [22] Gao C, Zeng J, Li Y, Jin F, Yuan J 2013 *High Energy Density Phys.* **9** 583
- [23] Fontes C J, Zhang H L, Abdallah Jr J, Clark R E H, Kilcrease D P, Colgan J, Cunningham R T, Hakel P, Magee N H, Sherrill M E 2015 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48** 144014
- [24] Ralchenko Y 2016 *Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas* (Berlin: Springer International Publishing) p127
- [25] Piron R, Gilleron F, Aglitskiy Y, Chung H-K, Fontes C J, Hansen S B, Marchuk O, Scott H A, Stambulchik E, Ralchenko Y 2017 *High Energy Density Phys.* **23** 38
- [26] Hansen S B, Chung H K, Fontes C J, Ralchenko Y, Scott H A, Stambulchik E 2020 *High Energy Density Phys.* **35** 100693
- [27] Hansen S B, Bauche J, Bauche-Arnoult C, Gu M F 2007 *High Energy Density Phys.* **3** 109
- [28] Pang J Q, Wu Z Q, Yan J 2007 *Commun. Comput. Phys.* **2** 1085
- [29] Bauche J, Bauche-Arnoult C, Fournier K B 2004 *Phys. Rev. E* **69** 026403
- [30] Park C 1990 *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics* (New York: Wiley Press) p5

## A simplified method of calculating electronic energy level populations in nonequilibrium plasmas<sup>\*</sup>

He Xin<sup>1)</sup> Jiang Tao<sup>2)</sup> Gao Cheng<sup>1)†</sup> Zhang Zhen-Fu<sup>1)</sup> Yang Jun-Bo<sup>1)</sup>

1) (College of Liberal Arts and Sciences, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

2) (Computational Aerodynamics Institute, China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China)

( Received 14 December 2020; revised manuscript received 7 February 2021 )

### Abstract

In order to investigate the radiative properties of plasma in non local thermodynamic equilibrium (NLTE), it is of great importance to determine energy level populations, which are often obtained by the so-called collisional-radiative (CR) model. As is well known, the CR model is accurate but computationally costly, and thus it is difficult to be applied to engineering calculations for such as complex three-dimensional plasmas.

In this work, a bound-state characteristic temperature (BCT) method is proposed, which can be used to calculate quickly the energy level populations in non-equilibrium plasmas. In this method, we assume that for each kind of ionization stage, the bound-state population is Boltzmannian at a certain characteristic temperature. The assumed characteristic temperature is related to the degree of none-equilibrium and may be different from the electronic temperature of the plasma. Based on a modified Saha equation, the assumed characteristic temperature can be calculated easily, and then the energy level populations are obtained conveniently. Five cases of non-equilibrium neon plasma at variable electronic temperatures and densities are investigated and compared with the results from a CR model. Good agreement is found between them if the degree of non-equilibrium is not very large. It shows that the present method is effective and at least 3000 times faster in computation time than the CR model. The method is very useful in engineering applications.

**Keywords:** nonequilibrium, plasmas, energy level populations

**PACS:** 52.25.-b, 52.25.Kn, 05.10.-a

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202119

<sup>\*</sup> Project supported by the National Numerical Windtunnel of China (Grant No. NNW2019ZT3-B07) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12074430).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: gaocheng@nudt.edu.cn