

**И.Ю. Вичев, А.С. Грушин, В.Г. Новиков,  
А.Д. Соломянная**

**КИАМ\_DB: база атомных данных  
для расчётов  
спектральных свойств плазмы**

**Москва  
ИПМ им. М.В. Келдыша  
2016**

УДК 533.9, 539.18, 004.62  
ББК 22.311, 22.314, 22.333  
К 43

**КИАМ\_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы.** И.Ю. Вичев, А.С. Грушин, В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная. — М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. — 94 с.

В книге описан оригинальный подход к работе с атомными данными на основе базы данных КИАМ\_DB в формате HDF5. Предложенный метод позволяет сократить объём хранимых на диске данных и повысить общую скорость вычислений. Кроме того, в книге приведено описание модели для построения базы данных, входящей в комплекс программ THERMOS, и методик расчёта радиационных свойств плазмы. Верификация атомных данных, методов и моделей проведена в сравнении с результатами, полученными по ведущим мировым кодам.

Для специалистов, работающих в области прикладной математики и атомной физики, а также студентов и аспирантов физических специальностей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №14-11-00699). Расчёты производились на суперкомпьютере “МВС-100К” (МСЦ РАН).

Электронная версия книги в формате PDF доступна по адресу  
*<http://keldysh.ru/e-biblio/vichev>*

## Оглавление

Введение.....	5
1 Структура базы данных .....	9
1.1 Основной принцип построения базы данных .....	9
1.2 Состояния ионов и уровни энергии .....	11
1.3 Радиационные и столкновительные переходы .....	14
1.4 Энергии ионизации.....	14
1.5 Автоионизационные переходы.....	15
1.6 Учёт тонкой структуры спектра.....	15
1.7 Уточнение атомных данных .....	19
2 Формирование базы данных в формате HDF5.....	23
2.1 Требования к формату данных .....	23
2.2 Краткое описание формата HDF .....	25
2.3 Общее описание базы для заданного элемента .....	31
2.4 Структура базы данных по среднему атому .....	31
2.4.1 Энергии ионизации .....	34
2.4.2 Структура группы иона .....	36
2.4.3 Характеристики одноэлектронных уровней .....	37
2.4.4 Описание состояний ионов .....	38
2.4.5 Описание переходов внутри иона .....	40
2.4.6 Описание ионизационных переходов .....	42
2.4.7 Описание автоионизационных переходов.....	44
2.5 Структура детальной базы данных .....	46
2.5.1 Детальное описание переходов .....	47
2.5.2 Группа иона .....	48
2.5.3 Описание структуры уровней .....	49
2.5.4 Усреднение детальных баз данных .....	50
2.6 Коррекция и верификация данных.....	51
3 Спектральные коэффициенты поглощения и излучения.....	52
3.1 Модель Саха: равновесная плазма .....	55
3.2 Столкновительно-излучательная модель плазмы .....	56
3.3 Сечения и скорости процессов .....	57
3.3.1 Скорости столкновительных процессов.....	58
3.3.2 Скорости радиационных процессов.....	64
3.3.3 Автоионизация и диэлектронный захват.....	67
3.4 Методика RUSAM .....	69

3.5 Частные случаи решения уравнения переноса излучения .....	72
3.5.1 Плоский слой .....	72
3.5.2 Цилиндрический слой .....	73
3.5.3 Интерполяция .....	74
3.6 Результаты расчётов .....	75
3.6.1 Плазма неона .....	75
3.6.2 Плазма олова.....	86
Литература .....	90

## Введение

Диагностика плазмы, разработка коротковолновых источников излучения и ряд других задач потребовали новых подходов для описания спектральных характеристик вещества, что вызвало необходимость создания баз атомных данных, содержащих информацию для проведения расчётов оптических свойств плазмы как в условиях термодинамического равновесия, так и при его отсутствии. В связи с этим в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН при сотрудничестве с Институтом спектроскопии РАН (ИСАН) была создана и активно пополняется база атомных данных KIAM\_DB [1].

В базе данных KIAM\_DB хранятся атомные характеристики веществ, необходимые для проведения расчётов радиационных свойств высокотемпературной плазмы. Во всемирной компьютерной сети Интернет существуют несколько аналогичных баз, содержащих как экспериментальные данные о свойствах веществ, так и теоретические результаты [2–6]. Но, как правило, информации, содержащейся в них, недостаточно для проведения расчётов характеристик плазмы в широком диапазоне температур и плотностей.

В результате многолетнего опыта проведения расчётов оптических свойств плазмы при решении ряда практических задач был выработан единый подход для хранения данных, необходимых для таких расчётов. Для каждого вещества в базе данных хранится информация, упорядоченная по степеням кратности ионов: энергии уровней, статистические веса, числа заполнения электронных оболочек, положение спектральных линий, силы осцилляторов и т.п. Используется формат HDF5 [7], который позволяет хранить накопленные данные в удобном для пользователя виде, легко дополнять их и модифицировать.

База данных пополняется с использованием программ THERMOS [8], FAC [9; 10], RCG [11]. При наличии экспериментальных данных предусмотрено внесение корректировок в значения энергетических уровней, положений линий и сил осцилляторов (например, на основе данных NIST [2], ИСАН [12] и др.).

Программный комплекс THERMOS, разработанный в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, позволяет проводить расчёты радиационных и термодинамических свойств равновесной и неравновесной плазмы в широком диапазоне температур и плотностей. Основные программы комплекса основаны на приближении среднего атома и используют для расчётов самосогласованный потенциал Хартри-Фока-Слэтера. Тестирование программ проводилось путём сравнения как с экспериментальными данными, так и с расчётами по другим кодам путём сопоставления результатов расчётов для плазмы различных веществ на Международных семинарах (LTE & NLTE Code Comparison Work-

shops, 1992 – 2015 годы, например, см. [13]). Получено хорошее соответствие с результатами ведущих кодов и экспериментальными данными.

Одним из тестовых примеров на международной конференции по непрозрачности WorkOp III (Garching, Germany, 1994) был расчёт непрозрачности в плазме железа, связанный с астрофизическими приложениями [14]. Оказалось, что плазма железа, несмотря на её относительно низкую концентрацию, определяет непрозрачность звёздных атмосфер цефеид [15]. Проведённые с высокой точностью расчёты с учётом спин-орбитального взаимодействия по программе OPAL в Ливерморской национальной лаборатории США [16] и подтверждающие результаты этих расчётов эксперименты в лаборатории Сандия позволили объяснить загадочное поведение цефеид на диаграмме Герцшпрунга-Рассела [15]. Учёт спин-орбитального взаимодействия при малых плотностях вещества приводит к уменьшению Росселандова пробела в несколько раз, что потребовало разработки нового подхода в программах комплекса THERMOS при проведении расчётов спектральных характеристик вещества при малых плотностях.

Для учёта спин-орбитального взаимодействия в рамках приближения среднего атома был разработан подход, позволяющий учитывать расщепление уровней [17]. Эта методика позволила значительно уточнить спектры многоэлектронных ионов. В результате была создана первая версия базы атомных данных, которая, оставаясь в рамках подхода среднего атома, позволяла уточнять спектральные характеристики веществ для заданной температуры и плотности в фиксированном диапазоне энергий фотонов. Число возбуждённых состояний ионов и учитываемых переходов было ограничено поставленной задачей. Как правило, учитывались одноэлектронные возбуждения на верхние оболочки, а также осуществлялся перебор всех возможных возбуждений внутри первой, не полностью заполненной оболочки. Однако даже такие ограничения приводили к неоправданно большому времени счёта и требовали создания новой базы, если, например, задавался другой диапазон по температуре и плотности вещества или другой интервал энергий фотонов.

Таким образом, возникла идея создания единой базы спектральных данных, которая могла бы быть использована для проведения систематических расчётов в широкой области параметров плазмы, включающей как детальные, так и усреднённые характеристики ионов. В качестве основных программ для наполнения базы атомными данными были выбраны программы FAC и RCG. Кроме спин-орбитального взаимодействия, они позволяют учитывать межконфигурационное взаимодействие с внесением поправок для уточнения характеристик спектральных линий, положение которых известно из

эксперимента. Расчёты внутриатомных потенциалов проводятся в приближении свободного иона и не зависят от температуры и плотности вещества. На основе программы FAC были построены базы атомных данных, содержащие уровни энергии и положения спектральных линий атомов и ионов от H- до Ne-подобных практически для всех элементов. Программа RCG Кауэна активно используется в ИСАН для идентификации и восполнения экспериментальных данных о спектральных линиях.

В 90-е годы насущной стала проблема разработки источника коротковолнового излучения (Extreme Ultraviolet, или EUV) на длине волны 13,5 нм для задач литографии [18]. Расчёты плазменных источников излучения требуют высокой точности атомных данных, так как полезный диапазон источника составляет всего 2% по длинам волн вблизи 13,5 нм. Конечно, возросли требования и к моделям излучающей плазмы. Для расчётов ионизационного равновесия и скоростей элементарных процессов потребовались дополнительные данные о веществе, что, в свою очередь, привело к изменению структуры базы данных. Разработанная в те годы версия базы атомных данных широко использовалась при решении различных задач физики плазмы при малом числе реализующихся конфигураций ионов.

Однако кроме лёгких элементов, в экспериментах используют и вещества со средним и большим атомным номером, в которых реализуется огромное число возбуждённых уровней. В этом случае в базах данных, полученных по программам FAC и RCG, невозможно учесть все конфигурации, требуемые для описания ионизационного равновесия. Кроме того, для учёта процессов автоионизации и диэлектронного захвата важно учитывать конфигурации с двумя и более возбуждёнными электронами. Это потребовало новых универсальных подходов для формирования баз атомных данных.

Известно, что при наличии большого числа различных состояний в плазме хорошо работает модель среднего атома [19–21]. Поэтому для расчёта базы данных в рамках комплекса THERMOS была разработана программа, с помощью которой проводятся расчёты уровней энергии и положения линий в приближении  $jj$ -связи для произвольных многоэлектронных возбуждений. Как было показано в [17], в случае тяжёлых элементов для описания профиля линий с учётом уширения хорошо применим метод Мошковского [22]. Таким образом, для каждого перехода в базе данных хранится его положение, суммарная сила осцилляторов и параметр уширения по Мошковскому. Число учитываемых конфигураций для одной степени ионизации может достигать нескольких тысяч. Приближение среднего атома позволило проводить расчёты спектров излучения неравновесной плазмы тяжёлых элементов за приемлемое время.

На основе подхода среднего атома построены специальные процедуры усреднения детальных баз атомных данных. При проведении вычислений, как правило, одновременно используется два типа данных: полученные по детальной методике с учётом явного расщепления уровней за счёт спин-орбитального взаимодействия для максимально точного описания спектров в заданном диапазоне энергий фотонов и редуцированная (усреднённая) база данных, необходимая для решения системы уравнений поуровневой кинетики (см., например, результаты расчётов спектров плазмы вольфрама [23]).

Благодаря взаимодействию с ИСАН, ФИ РАН им. П.Н. Лебедева, РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ, ИАЭ им. И.В. Курчатова, ТРИНИТИ и другими научными организациями, база данных KIAM\_DB постоянно пополняется и совершенствуется, что, наряду с развитием программ кинетики, позволяет получать необходимые спектральные данные для широкого круга задач, связанных с диагностикой плазмы и разработкой коротковолновых источников излучения.

В данной работе преимущественно используется система единиц Хартри:  $m_e = e = \hbar = 1$ . Там, где это более уместно, также применяются нанометры для длин волн, эВ для температуры и энергии фотонов,  $\text{г/см}^3$  для плотности вещества,  $1/\text{см}^3$  для плотности электронов; в таких случаях в тексте даны примечания.



# 1 Структура базы данных

## 1.1 Основной принцип построения базы данных

Различные модели плазмы и подходы для вычисления её свойств были детально проанализированы на семинарах по сравнению кодов [13]. Все эти модели требуют наличия базы атомных данных, в частности, энергий уровней ионов, сил осцилляторов, порогов ионизации.

В базе KIAM\_DB для веществ (элементов) с заданными атомным номером и атомным весом содержится информация о состояниях ионов и переходах, полученная с помощью различных приближений. Для каждого вещества база содержит как минимум два основных файла. Первый файл построен на модели среднего атома и содержит “полную” информацию о веществе. Во втором файле хранится детальная информация об уровнях энергии и линиях. Детальная информация может быть получена из разных источников.

Основная база данных формируется на основе модели среднего атома. При построении системы уравнений для вычисления потенциала, энергий уровней и волновых функций используются фиксированные числа заполнения уровней. Таким образом, из модели ХФС исключается зависимость от температуры, а плотность вещества выбирается таким образом, чтобы волновые функции электронов с главным квантовым числом  $n \leq n_{max}$  относились к дискретному спектру.

При каждой фиксированной степени ионизации вещества  $k = Z_0$  ( $k = 0 \div Z$ ) используется уравнение Шредингера для вычисления радиальной части волновых функций  $R_{n\ell}(r)$  в центрально-симметричном потенциале  $V(r)$

$$\varepsilon_{n\ell} R_{n\ell}(r) = -\frac{1}{2} R_{n\ell}''(r) + \left[ -V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} \right] R_{n\ell}(r), \quad (1)$$

где  $n$  – главное квантовое число,  $\ell$  – орбитальное квантовое число ( $n = 1 \div n_{max}, \ell = 0 \div n - 1$ ),  $\varepsilon_{n\ell}$  – уровень энергии. Внутриатомный потенциал удовлетворяет уравнению

$$V(r) = \frac{Z}{r} - \frac{1}{r} \int 4\pi r^2 \rho(r) dr + V_{ex}(r), \quad (2)$$

$V_{ex}(r)$  – обменная поправка к потенциалу в приближении Слэтера

$$V_{ex}(r) = - \left[ \frac{3}{4\pi^2 r^2} \sum_{nl} N_{nl} R_{nl}^2(r) \right]^{1/3}. \quad (3)$$

При вычислении электронной плотности используются фиксированные числа заполнения электронных уровней  $N_{nl}$ :

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{nl}^{n_{\max}} N_{nl} R_{nl}^2(r) + \rho_2(r). \quad (4)$$

Плотность свободных электронов предполагается постоянной по объёму атомной ячейки

$$4\pi \int \rho_2(r) r^2 dr = Z_0. \quad (5)$$

Кроме того, должно выполняться условие электронейтральности

$$\sum_{nl}^{n_{\max}} N_{nl} + Z_0 = Z. \quad (6)$$

С полученным внутриатомным потенциалом и волновыми функциями проводится вычисление сил осцилляторов одноэлектронных переходов

$$f_{nl, n'\ell'} = \frac{2}{3} \frac{\ell + \ell' + 1}{2(2\ell + 1)} \int_0^\infty R_{nl}(r) r R_{n'\ell'}(r) dr \quad (7)$$

и положения линий. Кроме того, проводится вычисление энергий возбуждённых конфигураций

$$E_Q = - \sum_{nl} N_{nl} \int R_{nl}(r) \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right) R_{nl}(r) dr + \sum_{nl} N_{nl} (N_{nl} - 1) H_{nl, nl} + \frac{1}{2} \sum_{nl \neq n'\ell'} N_{nl} N_{n'\ell'} H_{nl, n'\ell'}, \quad (8)$$

$$H_{\alpha, \alpha} = R_{\alpha, \alpha; \alpha, \alpha}^{(0)} - \frac{2\ell + 1}{4\ell + 1} \sum_{s=2}^{2\ell} \begin{pmatrix} \ell & s & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_{\alpha, \alpha; \alpha, \alpha}^{(s)},$$

$$H_{\alpha, \beta} = R_{\alpha, \beta; \alpha, \beta}^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_{s=|\ell-\ell'|}^{\ell+\ell'} \begin{pmatrix} \ell & s & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_{\alpha, \beta; \alpha, \beta}^{(s)}$$

на основе интегралов Слэтера

$$R_{\alpha,\beta;\alpha',\beta'}^{(\kappa)} = \int \int \frac{r_{<}^{\kappa}}{r_{>}^{\kappa+1}} R_{\alpha'}(r) R_{\beta'}(r') R_{\alpha}(r) R_{\beta}(r') dr dr', \quad (9)$$

$$r_{<} = \min\{r, r'\}, \quad r_{>} = \max\{r, r'\}.$$

Перебор возбуждённых состояний, как правило, ограничивается некоторым набором параметров, связанным с поставленной задачей (при этом электронные возбуждения могут быть многоэлектронными). При расчётах таблиц радиационных свойств используется обрезание конфигураций по энергии возбуждений. Количество учитываемых оболочек ограничено значением  $n = n_{max}$ .

Кроме того, в базе содержится вспомогательная информация, которая необходима при проведении расчётов: пороги ионизации, структура автоионизационных переходов и т.п. Эта информация может быть вычислена из исходных атомных данных, но так как время обработки файлов для её получения довольно значительное, целесообразно рассчитать её заранее и хранить вместе с исходными данными.

## 1.2 Состояния ионов и уровни энергии

Под состоянием иона фактически понимается некое “суперсостояние”, которое описывается его конфигурацией (релятивистской или нерелятивистской), суперконфигурацией (т.е. объединением конфигураций по некоторому признаку, например, с одним электроном в произвольном состоянии на некоторой оболочке), подконфигурацией (частью конфигурации, например, с выделением автоионизационных уровней) и т.п.

Под состоянием  $s$  иона  $k$ -й кратности  $Q_{ks}$  в дальнейшем для простоты изложения, как правило, понимаются нерелятивистские конфигурации с целыми фиксированными числами заполнения  $N_{nl}^{ks}$ . Однако могут рассматриваться как релятивистские конфигурации с числами заполнения  $N_{nlj}^{ks}$  ( $j$  – квантовое число полного момента электрона,  $j = \ell \pm 1 \geq 0$ ), так и объединённые суперконфигурации, описываемые числами заполнения  $N_n^{ks}$ , или части конфигураций.

Количество состояний  $s_{max}$  для заданной кратности иона произвольно и может увеличиваться в процессе дополнения базы. Максимальное главное квантовое число  $n_{max}$  является единым параметром для базы заданного элемента.

Структура группы  $ks$  состоит из описания суперсостояний конфигураций (суперконфигураций, подконфигураций), описания уров-

ней, переходов и т.п. Для описания суперконфигураций предусмотрено дополнительное разбиение по главному квантовому числу: в случае  $n \leq n_1$  – в конфигурации учитывается расщепление уровней по  $nlj$ ,  $n_1 < n \leq n_2$  – учитывается расщепление уровней по  $n\ell$ ,  $n_2 < n \leq n_{\max}$  – учитывается расщепление уровней только по  $n$ . В базах, формируемых с помощью программ THERMOS и FAC:  $n_1 = 0$ ,  $n_2 = n_{\max}$ .

Описания суперсостояния:

$s$  – номер состояния по порядку;

$E_{ks}$  – средняя энергия, эВ;

$g_{ks}$  – статистический вес;

$N_{nlj}$  – числа заполнения уровней  $nlj$  для  $n \leq n_1$ ;

$N_{n\ell}$  – числа заполнения уровней  $n\ell$  для  $n_1 < n \leq n_2$ ;

$N_n$  – числа заполнения уровней  $n$  для  $n_2 < n \leq n_{\max}$ .

Описания уровней:

$s$  – номер состояния;

$\gamma$  – номер энергетического уровня;

$J$  – полный момент;

$\Delta E_{ks\gamma J}$  – отклонение от средней энергии основного состояния  $E_{ks}$ ;

$g_{ks\gamma J}$  – статистический вес уровня.

Описания радиационных/столкновительных переходов:

$s$  – номер начального состояния;

$\gamma$  – номер энергетического уровня начального состояния;

$J$  – полный момент начального состояния;

$s'$  – номер конечного состояния;

$\gamma'$  – номер энергетического уровня конечного состояния;

$J'$  – полный момент конечного состояния;

$\Delta E_{ks\gamma J, ks'\gamma' J'}$  – энергия перехода в эВ между этими уровнями;

$gf$  – симметризованная сила осциллятора:

$$gf = (2J + 1)f(n\ell\gamma J, n'\ell'\gamma' J') = (2J' + 1)f(n'\ell'\gamma' J', n\ell\gamma J).$$

Описания автоионизационных переходов:

$s$  – номер начального состояния;

$\gamma$  – номер энергетического уровня начального состояния;

$J$  – полный момент начального состояния;

$s'$  – номер конечного состояния;

$\gamma'$  – номер энергетического уровня конечного состояния;

$J'$  – полный момент конечного состояния;

$\Delta E_{ks\gamma J, ks'\gamma' J'}$  – энергия перехода в эВ между этими уровнями;

$gf$  – симметризованная сила осциллятора.

Описание ионизационных переходов  $k \rightarrow k + 1$ :

$s$  – номер начального состояния;

$\gamma$  – номер энергетического уровня начального состояния;

$J$  – полный момент начального состояния;

$s'$  – номер конечного состояния;

$\gamma'$  – номер энергетического уровня конечного состояния;

$J$  – полный момент конечного состояния;

$\Delta E_{ks\gamma J, ks'\gamma' J'}$  – энергия перехода в эВ между этими уровнями;

$gf$  – симметризованная сила осциллятора.

Для каждого состояния  $ks$  в основной базе хранится сдвиг энергии по отношению к основному состоянию  $\Delta E_{ks} = E_{ks} - E_{k0}$  в эВ, статистический вес  $g_{ks}$  и, собственно, набор чисел заполнения  $N_{nl}^{ks}$ . В детальной базе содержится  $\Delta E_{ks\gamma J}$  – расщепление по уровням за счёт спин-орбитального взаимодействия (набор информации об уровнях  $ks\gamma J$ , где  $J$  – полный орбитальный момент иона,  $\gamma$  – дополнительный набор квантовых чисел, описывающий генеалогию образования уровня). Таким образом, в базе может содержаться дополнительная группа с отклонениями уровней энергии от энергии состояния  $ks$ :  $\Delta E_{ksJ\gamma} = E_{ks} - E_{ksJ\gamma}$  в эВ, статистическими весами  $g_{ksJ\gamma}$  и некоторой дополнительной информацией (например, названием терма, если это известно). Так как детальная база не может охватывать все конфигурации из основной, сохраняется и усреднённая информация о содержащихся конфигурациях.

Кроме того, для веществ со средним и большим зарядом ядра, когда вычисление полного набора детальных уровней затруднительно или невозможно, предусмотрено использование описания уровней в приближении  $jj$  связи по модели среднего атома. В этом случае расщепление по  $j$  учитывается лишь до некоторого значения главного квантового числа  $n_1 \leq n_{\max}$ . Для таких состояний записывается набор чисел заполнения релятивистских конфигураций  $N_{nlj}^{ks}$ .

Стоит отметить, что использование полной базы данных для тяжёлых и средних элементов ведёт к катастрофическому размеру матриц переходов и огромному увеличению времени счёта. В этих случаях перед проведением расчётов рекомендуется проводить свёртку (усреднение) по некоторым параметрам. Например, редуцирование базы с выделением одного возбуждённого электрона на верхних уровнях.

### 1.3 Радиационные и столкновительные переходы

Между конфигурациями ионов одной кратности возможны радиационные и столкновительные переходы возбуждения (девозбуждения). При описании этих переходов может потребоваться различная степень детализации.

В основной базе содержатся переходы между нерелятивистскими состояниями  $Q(k, s) \rightarrow Q'(k, s')$ , соответствующие переходам  $n\ell \rightarrow n'\ell'$ . Для фиксированного перехода хранится начальное и конечное состояние электрона  $(n\ell, n'\ell')$ , положение линии  $\omega(n\ell, n'\ell') = E_{ks'} - E_{ks}$  в эВ, симметризованная сила осциллятора

$$gf = \frac{N_{n\ell}}{g_{n\ell}} \left( 1 - \frac{N_{n'\ell'}}{g_{n'\ell'}} \right) g_{ks} \frac{1}{3} (\ell + \ell' + 1) \omega r_{n\ell n'\ell'}^2 \quad (10)$$

и гауссово уширение  $\sigma(ks, ks')$ , вычисленное, например, по методу Мошковского [22]. В детальной базе данных в этом случае, кроме положения линий  $\omega(ks\gamma J, ks'\gamma' J') = E_{ks'\gamma' J'} - E_{ks\gamma J}$ , силы осцилляторов  $gf$ , хранятся номера подуровней начального и конечного состояния  $(\gamma J, \gamma' J')$ .

### 1.4 Энергии ионизации

Кроме основных подгрупп, содержащих информацию о состоянии ионов и переходах в линиях, в процессе формирования массива данных создаётся вспомогательная подгруппа, отвечающая за пороги ионизации между состояниями различной кратности, содержащимися в базе данных. Такого типа данные необходимы для построения матрицы скоростей при решении системы уравнений поуровневой кинетики. В базе данных предусмотрена возможность хранения порогов ионизации с разной степенью детализации (в настоящее время в расчётах используются только пороги между нерелятивистскими конфигурациями).

Основная группа содержит переходы между нерелятивистскими конфигурациями  $Q(k, s) \rightarrow Q'(k+1, s')$ , соответствующими ионизации электрона с уровня  $n\ell$  в непрерывный спектр  $(N_{n\ell}^{k+1, s'} = N_{n\ell}^{k, s} - 1)$ . Для фиксированного перехода хранится само значение уровня электрона  $n\ell$ , число заполнения уровня  $N_{n\ell}^{k, s}$ , положение порога  $\omega(ks; k+1, s') = E_{k+1, s'} - E_{ks}$  в эВ, гаунт-фактор для учёта отличия реального сечения в пороге от сечения по формуле Крамерса, гауссово

уширение порога в эВ, которое может быть получено из усреднения детальной информации об уровнях энергии этой конфигурации.

## 1.5 Автоионизационные переходы

В малоплотной неравновесной плазме важную роль играют процессы автоионизации и диэлектронного захвата. Для учёта этих процессов при составлении кинетических уравнений используются парциальные сечения, для вычисления которых требуются заранее составленные файлы данных.

Обозначим конфигурации, которые принимают участие в процессе:  $Q(k, s)$  – начальное состояние иона с возбуждённым (автоионизирующимся) электроном на оболочке  $n\ell$ ,  $Q''(k+1, s'')$  – конечное состояние иона после процесса автоионизации. Кроме того, введём обозначение для промежуточного состояния иона  $Q'(k, s')$  после тушения возбуждения (в присутствии возбуждённого электрона на оболочке  $n\ell$ ). Пусть  $\omega(Q, Q') = E_{Q'} - E_Q$  – энергия, выделенная при тушении возбуждения  $Q(k, s) \rightarrow Q'(k, s')$ ,  $\omega(Q'', Q) = E_{Q''} - E_Q$  – энергия, переданная свободным электроном при автоионизации  $Q(k, s) \rightarrow Q''(k+1, s'')$ .

Путём перебора массивов данных, отвечающих за тушение возбуждения, с учётом необходимой для ионизации энергии составляется список переходов, которые могут привести к автоионизации возбуждённого состояния.

## 1.6 Учёт тонкой структуры спектра

С помощью модели среднего атома можно учесть максимально возможное число конфигураций для заданного элемента, что позволяет решать систему кинетических уравнений для определения степени ионизации вещества и населённости возбуждённых состояний с высокой точностью. Однако модель даёт довольно грубое приближение для положения линий и сил осцилляторов. При моделировании эксперимента, как правило, требуется описать спектр в заданном диапазоне длин волн. Одной из наиболее удобных и широко используемых программ для этого является программа FAC – (Flexible Atomic Code), написанная сотрудником LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory) Ming Feng Gu [9]. Программа предназначена для вычисления характеристик атомных радиационных и столкновительных процессов, включая энергии уровней, радиационные вероятности переходов, столкновительные возбуждение и ионизацию, фотоионизацию, автоионизацию, радиационную рекомбинацию и диэлектронный захват. Главной целью создания такого универсального пакета было желание

объединить в рамках одной теоретической системы расчёт всех атомных процессов, что обеспечивает самосогласованность между различными частями и даёт одинаково гибкий и удобный в работе пользовательский интерфейс. В настоящий момент код FAS доступен для использования под свободной лицензией. Изначально он представлял собой конгломерацию математических библиотек с открытым исходным кодом (в частности BLAS и LAPACK) и авторских разработок, большая часть которых была написана на языке Фортран. Начиная с 2010 г. E. Stambulchik планомерно переводит весь код на язык программирования C, чтобы, во-первых, реализовать возможность работы с большими объёмами данных, а во-вторых – убрать из кода зависимость от сторонних математических библиотек, написанных на Фортране.

Реализованный в FAS полностью релятивистский подход, основанный на применении уравнения Дирака, позволяет применять данный код к многозарядным ионам. Вычисление атомной структуры в программе основывается на релятивистской форме взаимодействия с использованием базиса, построенного из одночастичных волновых функций основного состояния.

Энергетические уровни иона с  $N$  электронами вычисляются путём диагонализации релятивистского гамильтониана  $H$ :

$$H = \sum_{i=1}^N H_D(i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (11)$$

где  $H_D(i)$  – одноэлектронный дираковский гамильтониан для потенциала  $V(r)$  с соответствующим зарядом ядра  $Z$ . Для построения волновой функции основного состояния  $\Phi_v$  используются одноконфигурационные состояния, являющиеся антисимметризованными суммами  $N$  одноэлектронных дираковских спиноров

$$\varphi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \\ iQ_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где  $\chi_{\kappa m}$  – спин-угловая волновая функция,  $n$  – главное квантовое число,  $\kappa$  – релятивистское угловое квантовое число, которое связано с орбитальным и полным моментом соотношением  $\kappa = (\ell - j)(2j + 1)$ , и  $m$  – проекция момента электрона  $j$  на ось  $z$ . При вычислении углового момента последовательных оболочек используется схема сложения моментов в приближении  $jj$ -связи.



Аппроксимационная волновая функция получается суперпозицией волновых функций основных состояний  $\Phi_\nu$  с той же симметрией

$$\psi = \sum_\nu b_\nu \Phi_\nu, \quad (13)$$

где  $b_\nu$  – коэффициент перемешивания, полученный из диагонализированного полного гамильтониана.

Волновые функции вычисляются на основе самосогласованного локального центрального потенциала с учётом экранировки ядерного потенциала. Релятивистские эффекты полностью включены в расчёт с помощью гамильтониана Дирака. Большие  $P_{nk}(r)$  и малые  $Q_{nk}(r)$  радиальные компоненты волновых функций электрона удовлетворяют паре уравнений Дирака для локального центрального потенциала  $V(r)$

$$\begin{aligned} \left( \frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) P_{nk}(r) &= \alpha \left( \varepsilon_{nk} - V(r) + \frac{2}{\alpha^2} \right) Q_{nk}(r), \\ \left( \frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) Q_{nk}(r) &= \alpha (-\varepsilon_{nk} + V(r)) P_{nk}(r), \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $\varepsilon_{nk}$  – собственное значение энергии.

Локальный центральный потенциал  $V(r) = V_a(r) + V_c(r) + V_{ex}(r)$  включает вклад от ядра  $V_a(r)$ , кулоновского  $V_c(r)$  и обменного  $V_{ex}(r)$  взаимодействий. Ядерный потенциал с учётом конечных размеров ядра может быть записан в виде

$$V_a(r) = \begin{cases} \frac{Z}{2} \left( \frac{r}{R_N} \right) \left[ 3 - \left( \frac{r}{R_N} \right)^2 \right], & r \leq R_N, \\ Z, & r > R_N \end{cases}, \quad (15)$$

где  $R_N = 2.2677 \cdot 10^{-5} A^{1/3}$  – статистический радиус ядра,  $A$  – атомный вес. Для обменного взаимодействия используется приближение Слэтера (3). Кулоновский член  $V_c(r)$  имеет вид

$$V_c(r) = \sum_{n\kappa} N_{n\kappa} \int \frac{\rho_{n\kappa}(r')}{r_{>}} dr', \quad (16)$$

$$\rho_{n\kappa}(r) = P_{n\kappa}^2(r) + Q_{n\kappa}^2(r).$$

Полученный потенциал содержит нежелательное самодействие и имеет ошибочное асимптотическое поведение при  $r \rightarrow \infty$ . Для электрон-электронного взаимодействия  $V_{ee}(r) = V_c(r) + V_{ex}(r)$  используется следующее выражение ( $a = n\kappa$ ,  $b = n'\kappa'$ ):

$$V_{ee}(r) = \frac{1}{r \sum_a N_a \rho_a(r)} \left\{ \sum_{ab} N_a (N_b - \delta_{ab}) Y_{bb}^0(r) \rho_a(r) + \right.$$

$$+ \sum_a N_a (N_a - 1) \sum_{k>0} f_k(a, a) Y_{aa}^k(r) \rho_a(r)$$

$$\left. + \sum_{a \neq b} \sum_k N_a N_b g_k(a, b) Y_{ab}^k(r) \rho_{ab}(r) \right\}, \quad (17)$$

где

$$\rho_{ab} = P_a(r)P_b(r) + Q_a(r)Q_b(r),$$

$$Y_{ab}^k(r) = r \int \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \rho_{ab}(r') dr', \quad (18)$$

$$f_k(a, b) = - \left( 1 + \frac{1}{2j_a} \right) \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2,$$

$$g_k(a, b) = - \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2, \quad (19)$$

$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$  –  $3j$ -символы Вигнера.

Такой выбор для электрон-электронного взаимодействия основан на выражении для электрон-электронного вклада в энергию конфигурации:

$$E_{ee} = \frac{1}{2} \sum_a N_a \int V_{ee}(r) \rho_a(r) dr. \quad (20)$$

Формула (20) даёт правильное асимптотическое поведение при больших значениях  $r$ , так как самодействие исключено.

При расчётах потенциал вычисляется не для заданной конфигурации, а для некоторой средней конфигурации с нецелыми числами заполнения. Средняя конфигурация обычно получается распределением электронов в начальных и конечных состояниях. Поэтому полученный потенциал не оптимизирован для отдельной конфигурации. Точнее, это – компромисс, связанный с тем, чтобы согласовать различные конфигурации. Для того чтобы уменьшить ошибку в энергиях уровней, связанную с использованием этого менее оптимизированного потенциала, применяется следующая процедура корректировки. Перед вычислением потенциала для средней конфигурации вычисляются оптимизированные потенциалы для каждой конфигурации, участвующей в расчёте, и их средняя энергия. Средняя энергия каждой конфигурации вычисляется повторно на основе потенциала, оптимизированного для средней конфигурации. Разность двух полученных средних энергий используется затем как поправка.

## 1.7 Уточнение атомных данных

При проведении газодинамических расчётов, как правило, используются заранее подготовленные таблицы спектральных коэффициентов и уравнений состояния на некоторой сетке по температуре и плотности, охватывающей область моделируемой плазмы. Для описа-

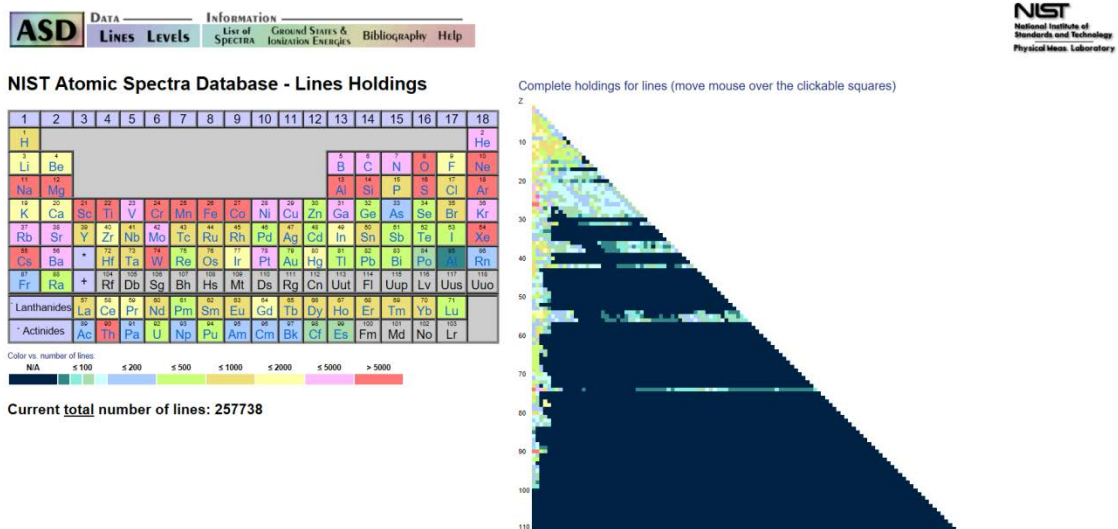


Рис. 1. Известные спектральные линии банка данных NIST по химическим элементам [24]

ния процессов, происходящих в эксперименте, зачастую достаточно учесть несколько групп по энергии фотонов, передающих основные особенности спектра. В таком случае точность положения линий, сил осцилляторов и сечений процессов, полученных по теоретическим моделям, оказывается вполне достаточной. Однако для описания эксперимента необходимо знать точное положение линий и сил осцилляторов. В настоящее время для уточнения положения линий и сил осцилляторов используются банки данных NIST (National Institute of Standards and Technology, USA) [2] и Spectr-W3 (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск) [6], а также версия атомного кода Кауэна [11], модифицированная А.Е. Крамидой для Лаборатории Атомной спектроскопии (ИСАН г. Троицк) [12].

Банк данных NIST разработан и поддерживается А.Е. Крамидой, Ю. Ральченко, Дж. Ридером и другими членами коллектива NIST ASD Team. В нем содержатся проверенные данные для радиационных переходов и уровни энергии атомов и ионов. Имеются спектральные данные для 99 элементов и уровни энергии для 89 элементов.

В банке данных можно найти спектральные линии и соответствующие им энергии уровней. Там же указываются известные данные о силе линий. Текущее наполнение банка данных по элементам можно узнать на странице List of Spectra (см. рис. 1).

Также банк данных содержит уровни энергии атомов и ионов относительно энергии основного состояния. Пример выдачи для  $\text{Cu}^{+6}$  приведён на рис. 2. Как можно видеть, кроме энергии уровней, в базе содержится энергия ионизации и ссылка на источники данных. Кроме того, можно определить основные состояния, термы и энергии ионизации различных атомов и ионов.

Помимо банка данных NIST, при верификации расчётных данных также используется банк данных Spectr-W<sup>3</sup>, созданный и поддерживаемый в сотрудничестве между РФЯЦ – ВНИИТФ и ОИВТ РАН [6].

Банк данных Spectr-W<sup>3</sup> содержит экспериментальные и теоретические данные о спектрах многозарядных ионов, взятые из публикаций в ведущих физических журналах, предоставленные разработчиками, а также полученные во ВНИИТФ. Данные сопровождаются комментариями о деталях эксперимента или методе проведения расчёта. На сегодняшний день банк данных Spectr-W<sup>3</sup> содержит более 450 000 записей о потенциалах ионизации, уровнях энергии, положении линий и сил осцилляторов, статистических весах и профилях линий. Кроме того, в банке данных есть параметры и формулы для аналитической аппроксимации столкновительных сечений и скоростей электронных переходов в ионах и атомах.

Ведётся работа по предоставлению результатов в формате XML в соответствии с международным стандартом XSAMS [25; 26]. Банк



## NIST Atomic Spectra Database Levels Data

Cu VII 5 Levels Found

Z = 29, V isoelectronic sequence

Data on Landé factors and level compositions are not available for this ion in ASD

Primary data source [Query NIST Bibliographic Database for Cu VII \(new window\)](#)  
[Sugar and Musgrove 1990](#) | [Literature on Cu VII Energy Levels](#)

Configuration	Term	J	Level (cm <sup>-1</sup> )	Reference
3d <sup>6</sup>	<sup>6</sup> S	<sup>5</sup> / <sub>2</sub>	0	<a href="#">L10559</a>
3d <sup>4</sup> ( <sup>5</sup> D)4p	<sup>6</sup> P <sup>o</sup>	<sup>3</sup> / <sub>2</sub>	497 641	
		<sup>5</sup> / <sub>2</sub>	497 881	
		<sup>7</sup> / <sub>2</sub>	498 343	
<b>Cu VIII (3d<sup>4</sup> <sup>5</sup>D<sub>0</sub>)</b>	<b>Limit</b>	<b>---</b>	<b>[1 121 000 (10000) ]</b>	<b><a href="#">L10559,L241c99</a></b>

Query time: 0.1 sec

Рис. 2. Известные уровни энергии для иона меди Cu<sup>+6</sup>

данных Spectr-W<sup>3</sup> включён в интернет-поисковик МАГАТЭ для атомных данных (GENIE) [27]. Кроме того, планируется создание нового раздела, содержащего экспериментальную информацию о спектрах рентгеновского излучения, зарегистрированных из различных источников плазмы.

На рис. 3 предоставлены результаты поиска энергий уровней для иона Sn<sup>+5</sup> в банке данных Spectr-W<sup>3</sup>. При создании такого же запроса через поисковую систему GENIE [27] можно видеть, что количество данных по уровням и линиям для этого иона мало. Однако при проведении расчётов желательно, чтобы данные, получающиеся из теоретических расчётов, соответствовали имеющимся экспериментальным данным.

Уточнение положения и силы основных линий в базе данных KIAM\_DB проводится в тесном сотрудничестве с отделом атомной спектроскопии ИСАН [28], где на основе экспериментальных данных

**SPECTR-W<sup>3</sup>** ENERGY LEVELS

Search results: Found records : 4

Num	Znuc	Zspec	Level name	Configuration	M	L	J	G	Energy, cm <sup>-1</sup>	Accuracy	Ground state	Radiative width	Method	Reference
1	50	5	(4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> 4d <sup>2</sup> 4f) <sup>3</sup> P <sub>1</sub>	4s(2)4p(6)4d(9)4f	3	P	1		417464				Thr	RS23
2	50	5	(4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> 4d <sup>2</sup> 4f) <sup>3</sup> P <sub>2</sub>	4s(2)4p(6)4d(9)4f	3	P	1		412316				Exp	RS24
3	50	5	(4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> 4d <sup>2</sup> 4f) <sup>3</sup> D <sub>2</sub>	4s(2)4p(6)4d(9)4f	3	D	1		419175				Thr	RS23
4	50	5	(4s <sup>2</sup> 4p <sup>4</sup> 4d <sup>2</sup> 4f) <sup>3</sup> D <sub>3</sub>	4s(2)4p(6)4d(9)4f	3	D	1		423372				Exp	RS24

Search conditions:  
Atom : Sn  
Isoelectronic sequence : Pd  
Sorted by : J

Рис. 3. Энергии уровней иона олова  $\text{Sn}^{+5}$  из банка данных Spectr-W<sup>3</sup>

проводятся расчёты спектров многоэлектронных ионов с помощью версии программы RCG: R.D. Cowan [11; 12; 29]. Методика, используемая в ИСАН, позволяет уточнить положение и силу линий (см. рис. 4). Более подробное описание метода на примере классификации спектров олова приведено в статьях [30–32].

Таким образом, для описания эксперимента необходимо наличие полной базы данных по среднему атому для решения кинетических уравнений. Положение и сила линий для наиболее вероятных ионов вычисляются по программам FAC или RCG. При наличии экспериментальных данных нужно проводить дополнительное уточнение. Так как все данные изначально имеют разные форматы, потребовалось создание единого способа их хранения и обработки.

При добавлении каждой новой порции детальной информации необходимо проведение корректировки базы. Для каждой поставленной задачи на основе исходных баз формируется промежуточная база, которая содержит как информацию из средней базы, так и необходимым образом редуцированную и уточнённую информацию из детальной. Принцип построения промежуточной базы данных, используемой при проведении вычислений, совпадает с основной.

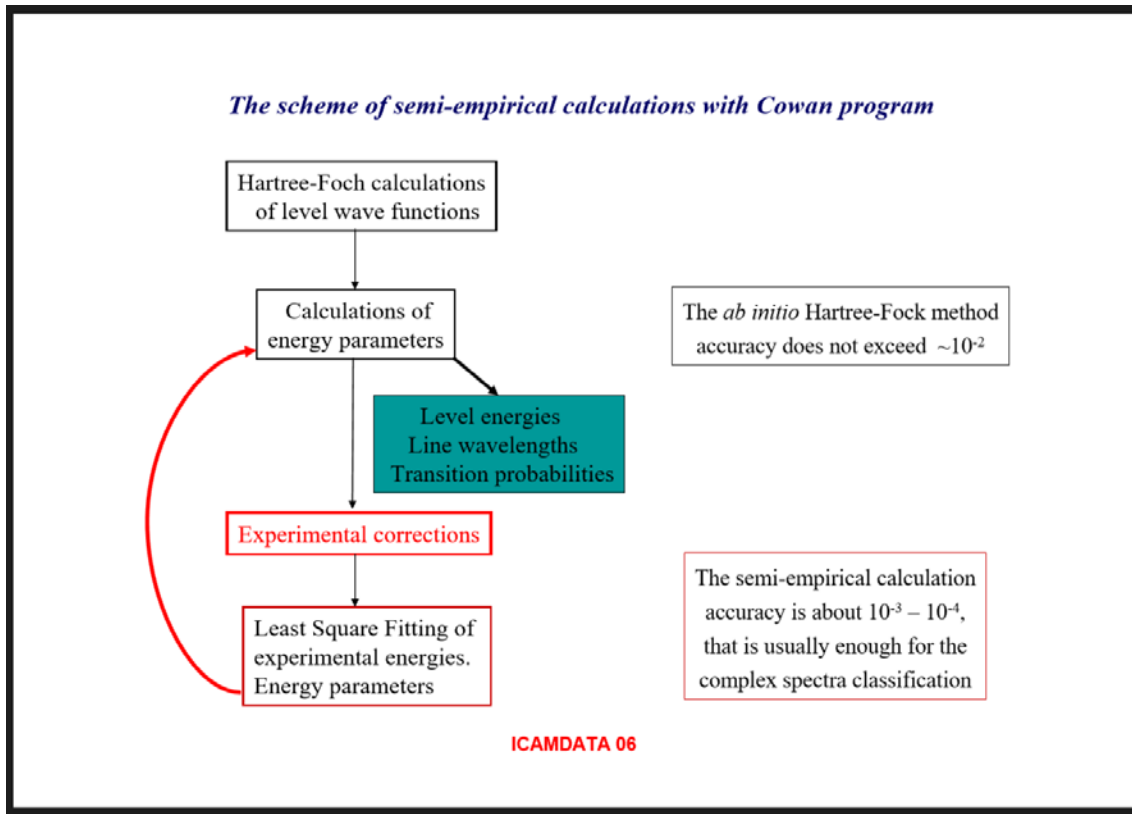


Рис. 4. Схема вычисления спектральных линий [29]

## 2 Формирование базы данных в формате HDF5

### 2.1 Требования к формату данных

В течение длительного периода база данных KIAM\_DB хранилась в виде набора текстовых файлов, каждый из которых описывал некоторые свойства заданного вещества. Это позволяло просматривать хранящуюся информацию, переносить файлы между системами (Windows ↔ Unix), корректировать и дополнять данные и использовать их в расчётах. Однако все возрастающие требования к точности расчётов и расширение класса задач привели к резкому увеличению объёма баз. Кроме того, одно и то же вещество могло использоваться в различных типах задач, что требовало различной степени детализации или различных диапазонов параметров для данных. Таким образом, возникла необходимость выбора более универсального формата хранения исходной информации, из которой можно было бы достаточно легко извлекать необходимые данные для текущих задач.

Основными требованиями к формату являлась возможность переноса данных между различными платформами, прямой доступ к требуемой информации, возможность дополнения и корректировки данных. Также в нашем случае одним из основных требований была

поддержка языка Fortran при работе с данными и возможность их использования в распараллеленных кодах с распределённой памятью. Всем этим требованиям удовлетворяет формат хранения данных HDF.

HDF (Hierarchical Data Format), иерархический формат данных, – название формата файлов, разработанного для хранения большого количества цифровой информации с учётом возможности использования распределённой памяти. Первоначально формат HDF был разработан Национальным центром суперкомпьютерных приложений (National Center for Supercomputing Applications, NCSA), в настоящее время поддерживается некоммерческой организацией HDF Group [7].

Библиотеки для работы с форматом HDF и связанные с ним утилиты доступны для использования под свободной лицензией. Формат HDF поддерживается многими коммерческими и некоммерческими программами, существуют библиотеки для работы с ним на языках Java, Fortran, Python и др. Свободно распространяемый пакет HDF состоит из библиотеки, утилит командной строки, исходных текстов для тестирования, интерфейса для Java, а также Java-программ для просмотра HDF-файлов.

Формат поддерживает файлы больших размеров. Содержимое файлов HDF организовано подобно иерархической файловой системе, в которой могут храниться два типа объектов:

- наборы данных, состоящие из многомерных массивов объектов одного типа (аналог файлов);
- группы, которые, в свою очередь, могут включать в себя как наборы данных, так и другие группы (аналог папок – директорий). Группа может быть пустой.

Сам файл с содержимым является своего рода корневой директорией. В каждой группе есть заголовок со списком объектов, которые в ней хранятся.

Как правило, файл с научными данными может содержать совершенно разные фрагменты: форматированный документ с описанием условий эксперимента, таблицу данных, видеоряд, информацию о математических моделях и результатах моделирования, короче говоря, множество весьма неоднородных как по размеру, так и по структуре записей. В каждой группе и наборе данных можно создать атрибут, в котором описаны такие дополнительные параметры, как точка отсчёта, используемая для интерпретации данных; единицы измерения; допустимые максимальное и минимальное значение данных; информация о калибровке данных, о способе их получения и т.п. Таким образом, для каждого набора данных, включённых в базу, существует “самоописание”, позволяющее упорядочить и стандартизировать механизмы доступа к записям разных форматов.



Такая структура неограниченной разветвлённости и вложенности даёт возможность хранить в одном файле разнообразную информацию, значительно ускоряя к ней доступ. Использование механизмов сжатия (ZLIB, SZIP) уменьшает объем хранимых данных, хотя может привести к замедлению работы с уже существующим файлом.

## 2.2 Краткое описание формата HDF

Для использования HDF5 необходимо скачать установочные файлы с сайта разработчика [7]. Там же можно узнать список систем, для которых проведено тестирование, и языков, которые поддерживаются в настоящее время. Далее описаны основная терминология и особенности использования HDF5.

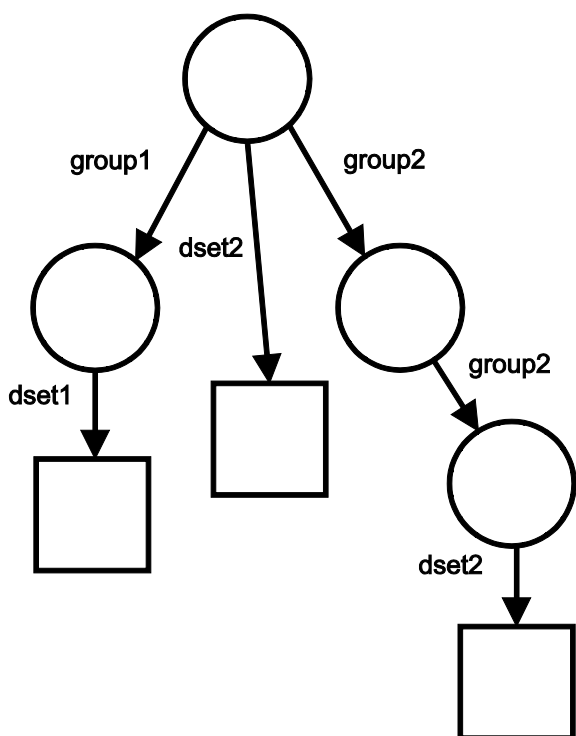
**Организация файла.** HDF формат 5-й версии – HDF5 – предназначен для хранения разнообразных научных данных и может содержать 2 типа объектов: группы и наборы данных.

**HDF5 группа.** Групповая структура, содержащая 0 или больше HDF5 объектов. Группы могут содержать наборы данных или другие группы. Каждая группа содержит две части:

- заголовок группы, который содержит имя и список атрибутов;
- таблицу групповых символов (group symbol table) со списком объектов HDF5, которые относятся к этой группе.

**HDF5 набор данных.** Многомерный массив объектов одного типа.

Любая группа или набор данных могут содержать список атрибутов. **Атрибутом HDF5** называется пользовательская HDF5 структура,



которая содержит дополнительную информацию об объекте.

Работа с группами и наборами данных во многом совпадает с работой с директориями и файлами в системе UNIX. Как директории и файлы в UNIX, ссылка на HDF5 объекты и HDF5 файлы производится по полному пути (full / absolute path name). Таким образом

/ означает корневой каталог.

/foo ссылка на группу foo.

/foo/zoo ссылка на группу zoo, который в свою очередь входит в корневой каталог группы foo.

Интерфейс библиотеки HDF5 включает в себя несколько библиотек API (application programming interface), которые содержат процедуры для создания, доступа и работы с HDF5 файлами и объектами. Библиотеки реализованы на языке C. Доступ к библиотекам HDF5 из программ, написанных на других языках программирования (FORTRAN 90, C++, Java, MATLAB, Python), реализуется через соответствующие интерфейсы. Все подпрограммы для языка C в библиотеке HDF5 начинаются с префикса вида H5 \*, где \* – одна или две заглавные буквы, обозначающие тип объекта, с которым работает функция. Подпрограммы для Фортрана начинаются с h5 и заканчиваются \_F.

Приведём примеры API: H5 – библиотека функций общего назначения, H5A – библиотека функций для работы с атрибутами, H5D – библиотека функций для работы с наборами данных, H5G – библиотека функций для работы с группами, H5F – библиотека функций для работы с файлом.

**Работа с файлом.** При создании файла приложение должно определить не только имя файла, но и форму доступа, список свойств и доступ к списку свойств (*file access mode*). При создании файла доступ определяет тип действий, которые будут выполняться, если файл уже существует:

- H5F\_ACC\_TRUNC – если файл существует, его содержимое будет уничтожено и приложение занесёт в файл новые данные;
- H5F\_ACC\_EXCL – выдаст ошибку, если файл существует. Если такого файла нет, параметр игнорируется.

Если файл существует, то возможно 2 вида доступа:

- H5F\_ACC\_RDONLY – приложение может только читать;
- H5F\_ACC\_RDWR – приложение имеет доступ на чтение и запись.

Список свойств создаваемого файла (*file creation property list*) позволяет управлять файлом метаданных. Список свойств доступа (*file access property list*) позволяет управлять различными методами ввода-вывода в файл и может использоваться для определения метода закрытия файла (например, невозможно закрыть файл, пока все объекты в файле не закрыты). Можно использовать параметры по умолчанию, H5P\_DEFAULT.

Для создания и закрытия HDF5 файла необходимо выполнить следующие шаги:

- определить свойства файла и параметры доступа;
- создать файл;
- закрыть файл и, если требуется, закрыть список свойств созданного файла.

Подробную информацию о формах доступа, списке свойств можно узнать из описания библиотеки HDF на сайте разработчика.

**Работа с группами.** HDF5 группа (Group) представляет собой структуру, содержащую ноль или более объектов HDF5 (групп или наборов данных). Для создания группы необходимо:

- определить идентификатор объекта, в котором будет создана группа;
- создать группу и получить идентификатор группы;
- по окончании работы с группой её необходимо закрыть, указывая идентификатор.

Подробная информация о работе с группами содержится в описании библиотеки H5G.

**Имена объектов (пути к объектам).** Для создания объекта HDF5 требуется указать место (path), где объект должен быть создан. Это место определяется идентификатором объекта HDF5 и именем (путём) объекта, который должен быть создан. Имя создаваемого объекта может быть либо абсолютным, либо относительным к указанным идентификаторам.

Имена объектов HDF5 представляют собой список компонентов, разделённых символами “/”. Есть несколько ограничений на имена: имена компонентов могут быть любой длины, кроме нулевой, могут содержать любые символы, кроме символа “/”, и иметь нулевое окончание. Полное имя может состоять из любого количества имён компонентов, разделённых “/”, причём любое из названий компонент может иметь специальное название.

Имя, которое начинается с символа “/”, – абсолютное имя объекта, доступ к которому осуществляется начиная с корневой группы файла; в противном случае доступ к объекту будет проведён начиная с указанной группы. Особый случай представляет имя /, которое всегда относится к корневой группе.

**Набор данных (DataSet)** является многомерным массивом элементов данных. Набор данных хранится в файле в виде двух частей: заголовок и собственно массив данных.

Заголовок содержит информацию, которая необходима для интерпретации частей массива в наборе данных (метаданные), и описывает набор данных. Он может включать информацию об имени объекта, его размерности, типе данных, о том, как организовано хранение массива на диске, и другую информацию, которая позволяет ускорить обработку массива.

Заголовок любого набора данных содержит 4 типа информации: наименование, тип данных, пространство данных и способ хранения.

**Наименование** набора данных может состоять из букв и цифр (ASCII).

В HDF5, тип данных и пространство данных являются независимыми объектами, которые создаются отдельно от набора данных, к которому они относятся. В связи с этим, создание набора данных требует определения типа данных и пространства данных.

**Типы данных.** HDF5 допускает использование различных типов данных. Однако можно выделить две основных категории типов данных в HDF5: атомарный и составной. Атомарный тип данных может зависеть от системы. Все типы данных именованы.

- Атомарный (*atomic*) тип не может быть разложен на более мелкие единицы. Пример: целое или вещественное.
- Натуральный (*native*) тип данных зависит от представления атомарного типа в операционной системе.
- Составной (*compound*) тип данных является производным типом данных и может содержать несколько видов атомарных данных.
- Именованный (*named*) тип данных может быть атомарным или составным, предназначен для передачи данных между различными наборами данных.

Дополнительная информация о типах данных содержится в описании библиотеки H5T.

**Пространство данных (DataSpace)** описывает размерность массива данных. Например, N-мерный массив точек данных называется простым пространством данных. Набор данных, организованных в произвольном порядке, называется сложным пространством данных. Размерность набора данных может быть фиксированной (неизменной) или неограниченной (расширяемой). С помощью пространства данных можно описать только часть набора данных, что позволяет делать операции частичного ввода / вывода по выбору.

К свойствам пространства данных относятся размерность набора данных, а также действительный и максимальный размеры массива по каждому из измерений. Для фиксированной размерности действительный и максимальный размер совпадают. В случае неограниченной размерности максимальный размер задаётся параметром H5P\_UNLIMITED.

Из объекта пространства данных могут быть выделены подмножества для обеспечения несмежного доступа к данным, что позволяет читать или писать фрагменты массива данных (*hyperslab*). Для заданного массива данных размерности  $n$  возможно использовать 4 вида выборки (*selection*):

1. выделение логически связанного  $n$ -мерного подмножества массива;
2. выделение несвязанного подмножества элементов или блоков элементов равной размерности;

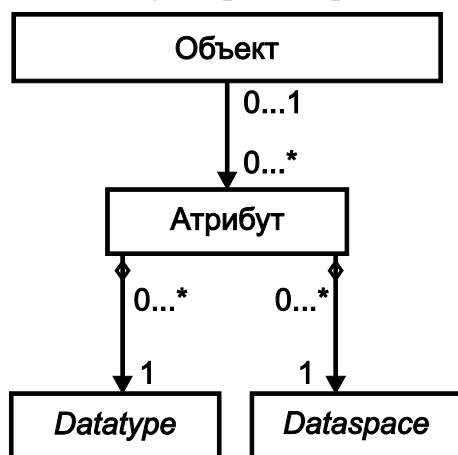
3. выделение всего массива данных как подпространства;
4. выборка отдельных независимых точек.

Для каждой операции ввода-вывода нужно указать начальную и конечную точки массива, а также создать два пространства данных: одно будет описывать распределение памяти в приложении, а второе – в файле. Подробнее о подпрограммах работы с частями массива можно прочитать в описании библиотеки H5S.

**Пространство хранения данных.** Хранение данных может осуществляться разными способами. По умолчанию используется непрерывный (*continuous*) тип хранения данных, посредством которого данные размещаются на диске так же, как и в памяти. Кроме того, в HDF5 поддерживается фрагментарное (*chunked*) хранение, когда набор данных разбивается на равные фрагменты, хранящиеся отдельно.

Фрагментарное хранение имеет три основных преимущества:

- ускоряет производительность за счёт ускорения доступа к данным;



- предоставляет возможность сжатия больших наборов данных;
- позволяет расширить набор данных по любой размерности.

Более подробную информацию можно узнать из раздела Datasets в HDF User's Guide и Dataset Chunking Issues.

Чтобы создать набор данных, необходимо указать место его создания, имя, тип данных и размер пространства для массива данных и списка свойств.

Приведём порядок создания пустого набора данных:

1. задать идентификатор группы, в которой будет создан набор данных;
2. задать характеристики набора данных;
3. определить тип данных;
4. задать пространство (*dataspace*);
5. указать список свойств или использовать заданный по умолчанию;
6. создать набор данных;
7. закрыть тип данных, пространство данных и список свойств, если необходимо;
8. закрыть набор данных.

**Атрибуты** представляют собой небольшие наборы данных, которые могут быть использованы для описания свойств и/или предполагаемого использования объекта, к которому они присоединены (группа, набор данных или именованный тип данных). Атрибут состоит из

2 частей: имя и значение. Значение атрибута может содержать одну или несколько записей одного и того же типа данных. Чтение и запись атрибутов осуществляется посредством библиотеки API HDF5. Создание атрибута аналогично созданию набора данных.

Атрибуты могут быть считаны или записаны только целиком; частичный ввод/вывод не поддерживается. Поэтому для выполнения операций ввода/вывода атрибута приложение должно указать только атрибут и тип данных памяти атрибута.

**Параллельное программирование с HDF5.** Использование многопроцессорных ЭВМ при работе с HDF5 требует использования библиотеки Parallel HDF5 API. Для обработки параллельного HDF5 файла могут быть использованы как последовательные, так и параллельные алгоритмы.

В Parallel HDF5 API содержатся подпрограммы:

- операции над файлами: создать, открыть и закрыть файл;
- операции над объектами: создать, открыть и закрыть набор данных;
- операции над структурой данных – расширение набора данных (за счёт увеличения размерности массивов);
- операции над данными: запись или чтение данных из массива (передача данных может быть как одновременной, так и независимой).

После открытия файла все части файла будут доступны всем процессам, как и все объекты файла, процессы могут писать в один и тот же набор данных, каждый процесс может писать в свой набор данных.

При создании файла HDF5 необходимо установить в списке свойств доступа (file access property list) возможность параллельного ввода-вывода. При работе с набором данных в свойствах передачи данных (file transfer property list) необходимо указать возможность совместного или независимого ввода-вывода.

Каждый процесс при работе с массивом данных

- выделяет память под свой фрагмент данных;
- выполняет над фрагментом данных операции чтения/записи, которые могут быть либо совместными, либо независимыми.

**Просмотр содержимого существующего файла hdf5** может быть осуществлён разными способами с использованием

- HDF-Java браузера – HDFView – для открытия и просмотра файла hdf5. Программа написана на языке Java, поэтому требует также установки виртуальной машины Java;
- утилиты h5dump, которая позволяет отобразить содержимое файла HDF5.

HDFView и h5dump – автономные инструменты, которые нельзя использовать в приложении.

Если требуется узнать содержимое файла внутри приложения, можно воспользоваться функцией H5Dopen, которая открывает указанный набор данных, и считывать его посредством подпрограммы H5Dread. H5Dopen и H5Dread подразумевают, что имя набора данных известно.

Из программ сторонних разработчиков наиболее известна HDF Explorer, которая позволяет визуализировать иерархическую структуру HDF в удобной для восприятия форме и экспортировать содержимое наборов данных как текст. Разработана для операционной системы Windows® [33].

**Выборка данных.** На сайте разработчика приведены различные утилиты для просмотра содержимого файлов HDF и извлечения из них растровых, двоичных или ASCII данных. Одна из них – hdp, обеспечивающая простейший способ выгрузки объектов HDF в двоичный или ASCII формат. Для работы с утилитой надо установить набор библиотек ZLIB и SZIP.

### 2.3 Общее описание базы для заданного элемента

Из расчётных и экспериментальных данных для заданного вещества (элемента) составляются различные варианты баз атомных данных. Наиболее полной является база данных, полученная на основе модели среднего атома DBA\_#sub.h5, в которой учтено максимально возможное число многоэлектронных возбуждений. В дополнительной базе DBD\_#sub.h5 хранится детальная информация о спектральных линиях, полученная с помощью программ атомной физики с коррекцией данных на эксперимент. Такие данные, как правило, не полны, особенно для элементов с большим атомным номером, однако являются наиболее точными для описания спектров.

При проведении расчётов на основе этих двух типов баз формируется промежуточная база атомных данных DBtmp\_#sub.h5, получаемая путём слияния базы по среднему атому с детальной базой с учётом специфики конкретной задачи.

В названиях баз данных, соответствующих конкретному элементу, содержится химический символ этого элемента #sub (например, имена баз для алюминия будут следующими: DBA\_A1.h5, DBD\_A1.h5).

### 2.4 Структура базы данных по среднему атому

В базе DBA для конкретного вещества с заданным атомным номером и атомным весом хранится информация о возможных состояниях ионов и переходах. Кроме того, содержится ряд вспомогательной

информации, которая постоянно используется при вычислениях: пороги ионизации, энергии парциальных переходов в процессах автoионизации и т.п.

База данных по среднему атому содержит группы, соответствующие степеням кратности ионов. Название этих групп формируется из химического символа элемента и степени ионизации вещества. Так, например, иону  $C^{+4}$  будет соответствовать группа C4, а нейтральному Fe – Fe0. Общая структура базы данных по среднему атому приведена в таблице 1.

Таблица 1: Структура базы данных по среднему атому

Название	Что содержит	Как хранится	Примечание
Atomic Data	Атомные данные	DATASET	атомный номер и вес
History DB correction	История изменений базы данных	DATASET	пополняемый набор данных
Ionization potential	Потенциалы ионизации	DATASET	фиксированный набор данных
#sub #k	Информация по ионам с кратностью ионизации k	GROUP	–

На рис. 5 приведён образец структуры базы данных по среднему атому для алюминия: группы по степеням кратности, набор атомных данных, описание истории изменений базы и потенциалы ионизации.

Набор атомных данных AtomicData содержит атомные данные, необходимые для проведения расчётов, и является строкой данных составного типа (compound). В ячейках содержатся константы, определённый атомный номер и атомный вес элемента. Описание записи в наборе данных приведено в таблице 2.

Таблица 2: Структура записи в наборе данных AtomicData

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	AtDataName(1)	REAL	"Atomic Number";	атомный номер
2	AtDataName(2)	REAL	"Atomic Weight";	атомный вес



Названия полей структуры для корневой группы находятся в файле 'AtData.inc':

```

INTEGER, PARAMETER :: rankAtData = 1
INTEGER(HSIZE_T) :: maxdimsAtData(rankAtData)
INTEGER(HSIZE_T) :: dimsAtData(rankAtData)
INTEGER(HID_T) :: memAtData_id(2) ! Memory datatype identifier
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: AtDataName(2) = /("Atomic Number",
"Atomic Weight",)/

```

Описание всех изменений базы данных хранится в пополняемом наборе данных "History DB Correction" в виде строковых констант длиной 256 символов.

В атрибут "Ground principal numbers nmax, (nlj), (nl)" базы данных записываются три значения главного квантового числа n: nmax – максимальное главное квантовое число, до которого проводится перебор конфигураций в базе данных, (nlj) – число оболочек с перебором чисел заполнения уровней в релятивистском приближении, (nl) – число оболочек с расщеплением в нерелятивистском приближении. В случае (nlj) = 0 – перебор чисел заполнения уровней в базе проводится в нерелятивистском приближении.

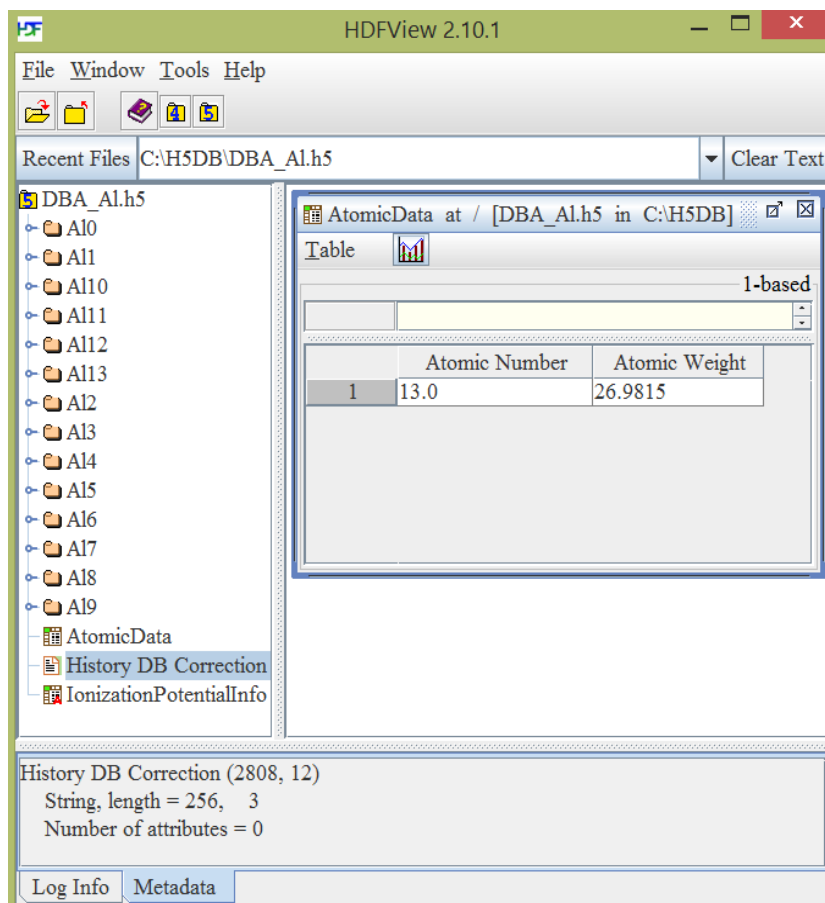


Рис. 5. Образец структуры базы данных и записи атомных данных для алюминия

Оболочки с  $(n_l) < n \leq n_{\max}$  учитываются без расщепления по орбитальному квантовому числу.

На рис. 6 показана история изменений базы. Из записи атрибута можно видеть, что текущая база вычислена для нерелятивистских конфигураций с максимальным главным квантовым числом  $n_{\max}=6$ .

### 2.4.1 Энергии ионизации

Набор атомных данных `IonizationPotential` содержит энергии ионизации всех ионов и является массивом данных составного типа (`compound`). Количество записей определяется атомным номером элемента. Число полей структуры равно 6. Описание записи в набор данных приведено в таблице 3.

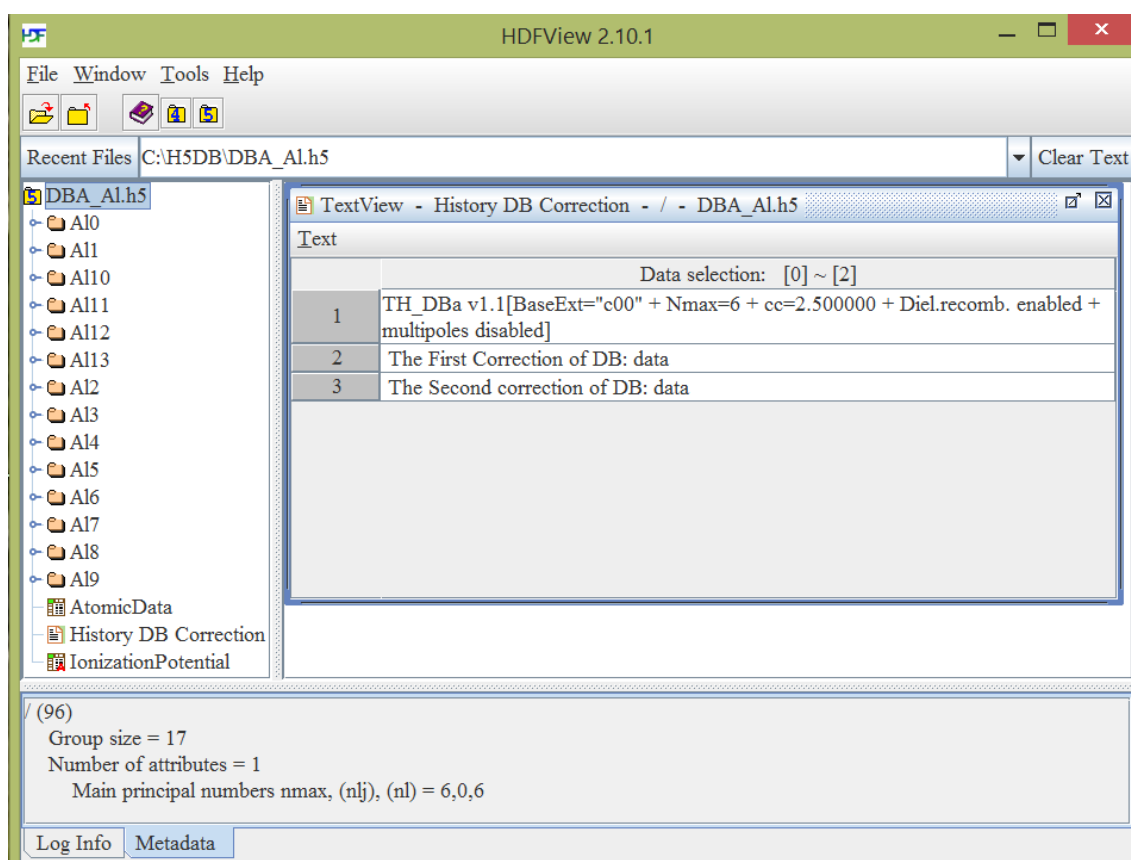


Рис. 6. Образец структуры базы данных по среднему атому для алюминия

Таблица 3: Структура записи (COMPOUND)  
в наборе данных IonizationPotential

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	NameIk (1)	INTEGER	"k";	кратность ионизации
2	NameIk (2)	INTEGER	"n";	главное квантовое число
3	NameIk (3)	INTEGER	"l";	орбитальное квантовое число
4	NameIk (4)	REAL	"Stat.Weight"	статистический вес основной конфигурации
5	NameIk (5)	REAL	"IonizationPotential, eV"	Энергия ионизации основной конфигурации, эВ
6	NameIk (6)	REAL	"Ground ConfigEnergy, eV"	Энергия основной конфигурации, эВ

Названия полей структуры для группы находятся в файле 'IkInfo.inc':

```

INTEGER, PARAMETER :: rankIkData = 1
INTEGER(HID_T) :: memIkData_id(0:5) ! Memory datatype identifier
INTEGER(SIZE_T) :: type_size(0:5) ! Size of the integer datatype
INTEGER(HID_T) :: data_type(0:5);
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameIkGroup = "IonizationPotential"
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameIk(0:5) = ("/"k", "n", "l", &
"Stat.Weight", "IonizationPotential, eV", &
" Ground ConfigEnergy, eV"/);
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: AttrIkGroupName = "Calculation method"
CHARACTER(LEN=80) :: AttrIkGroup

```

В атрибут набора данных введено описание метода получения энергий ионизации. Имя атрибута "Calculation method". Атрибут представляет собой строковую константу AttrIkGroup не более 80 символов. На рис. 7 приведён образец записи потенциалов ионизации в базе данных KIAM\_DB для алюминия. В строке атрибута можно видеть, что в данном примере данные получены по модели среднего атома без корректировки на эксперимент.

## 2.4.2 Структура группы иона

В каждой из групп, соответствующей фиксированной кратности ионизации  $k$ , содержатся группа с описанием конфигураций и наборы данных радиационных, ионизационных и автоионизационных переходов. Кроме того, в группе также содержится набор данных с энергиями уровней и эффективным зарядом ядра. Структура группы для заданного иона приведена в таблице 4.

Table

	k	n	l	Stat. We...	IonizationPot...	GroundConfigEnergy, eV
1	0	3	1	6.0	5.620478	-6589.3643
2	1	3	0	1.0	18.01601	-6585.8916
3	2	3	0	2.0	27.9022	-6568.5796
4	3	2	1	1.0	121.2072	-6540.6934
5	4	2	1	6.0	157.0436	-6422.399
6	5	2	1	15.0	196.0155	-6267.7734
7	6	2	1	20.0	238.021	-6073.762
8	7	2	1	15.0	282.982	-5837.366
9	8	2	1	6.0	330.8305	-5555.631
10	9	2	1	1.0	384.7152	-5225.642

IonizationPotential (2152, 16)  
Compound/Vdata, 14  
Number of attributes = 1  
Calculation method = Average Atom without Experimental Correction

Рис. 7. Образец записи потенциалов ионизации в базе KIAM\_DB для алюминия

Таблица 4: Структура группы для фиксированного иона

Название	Что содержит	Как хранится	Переменная в 'IonkInfo.inc'
Effective Nuclear Charge and Energy levels (eV)	Эффективный заряд ядра и энергии уровней	DATASET	ZnlEnlName
Configuration Description	Описание конфигураций	DATASET	NameQD
Transition Description	Переходы между конфигурациями без изменения заряда ядра	DATASET	NameQT
PhotoIonization Transition	Фотоионизационные переходы	DATASET	NamePH
AutoIonization Transition	Автоионизационные переходы	DATASET	NameAI

Названия полей структуры для группы находятся в файле 'IonkInfo.inc':

```

INTEGER(HID_T) :: grQD_id, grQT_id, grPH_id, grAI_id; ! Group
identifiers
CHARACTER(LEN=4) :: Sub_k;
CHARACTER(LEN=*) , PARAMETER :: NmaxAvDB = &
"Main principal numbers nmax, (nlj), (nl)"
CHARACTER(LEN=*) , PARAMETER :: NameQD = "Configuration Description"
CHARACTER(LEN=*) , PARAMETER :: NameQT = "Transition Description"
CHARACTER(LEN=*) , PARAMETER :: NamePH = "PhotoIonization Transition"
CHARACTER(LEN=*) , PARAMETER :: NameAI = "AutoIonization Transition"

```

### 2.4.3 Характеристики одноэлектронных уровней

Набор атомных данных Effective Nuclear Charge and Energy levels (eV) содержит эффективные заряды ядра и энергии уровней в эВ для каждого иона. Данные хранятся в виде строки данных составного типа (compound). Число данных определяется главным квантовым числом. Описание записи в набор данных приведено в таблице 5.

Таблица 5: Структура записи в наборе данных Effective Nuclear Charge and Energy levels (eV)

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	ZeName(1)	REAL	Znl	эффективный заряд ядра
2	ZeName(2)	REAL	Enl, eV	энергия уровня в эВ
3	ZeName(3)	CHARACTER(LEN=3)	Level	уровень

Названия полей структуры находятся в файле 'ZnlEnl.inc':

```

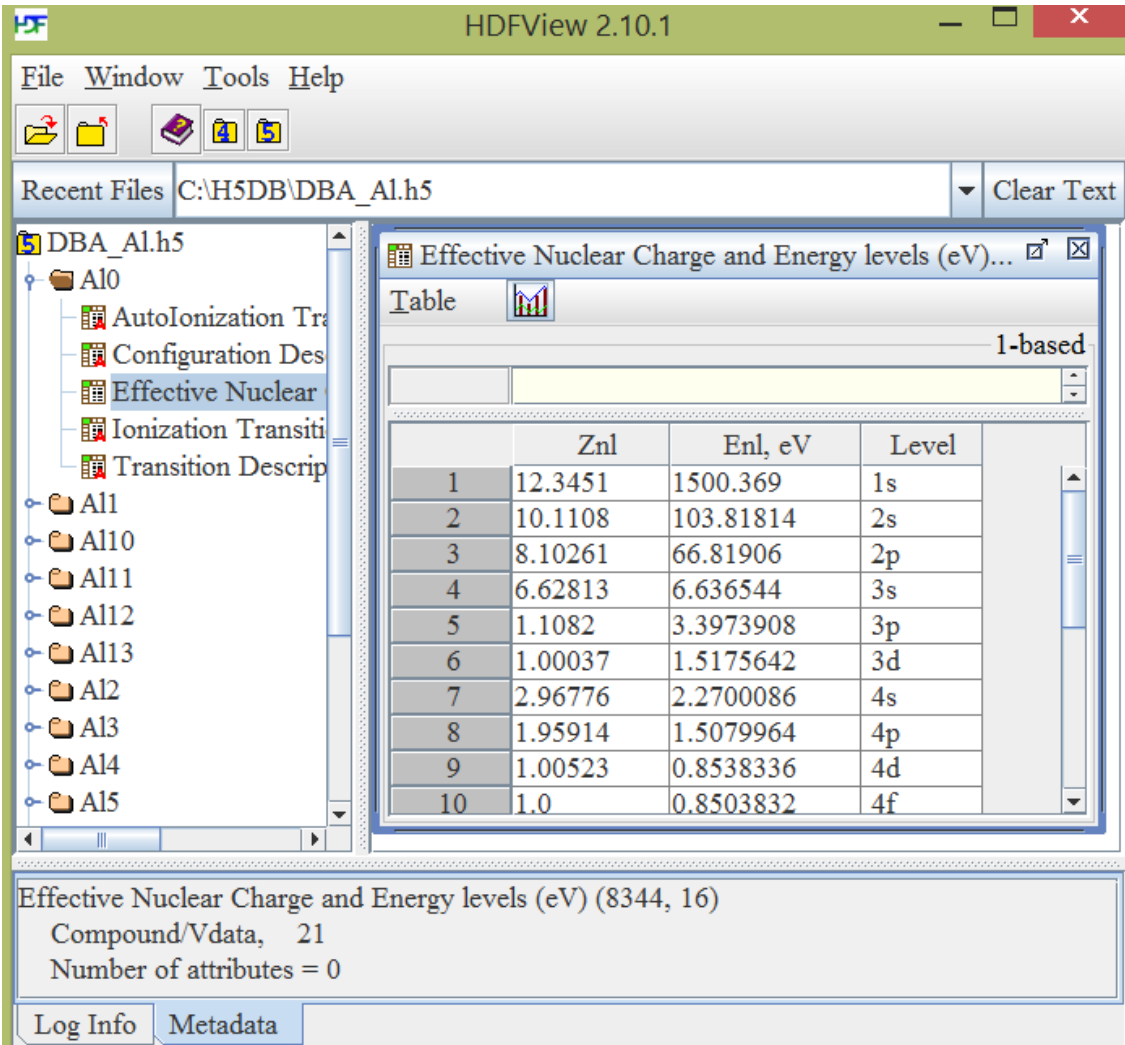
INTEGER(HID_T) :: ds_id; ! Dataset identifier
INTEGER, PARAMETER :: rankZEData = 1
INTEGER(HID_T) :: memData_id(3) ! Memory datatype identifier
INTEGER(HID_T) :: data_type(3); ! datatype
INTEGER(SIZE_T) :: type_size(3) ! Size of the datatype
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: ZnlEnlName = &
"Effective Nuclear Charge and Energy levels (eV)"
character(LEN=*), PARAMETER :: ZeName(3) = (/ ' Znl ', 'Enl, eV', 'Level
' /)

```

На рис. 8 приведён образец структуры: набора данных для описания конфигураций, переходов, а также эффективного заряда ядра и энергии уровней для нейтрального иона алюминия.

#### 2.4.4 Описание состояний ионов

Набор атомных данных Configuration Description содержит описание нерелятивистских конфигураций. В базе данных со-



The screenshot shows the HDFView 2.10.1 interface. The main window displays a tree view of the data structure, with 'Effective Nuclear Charge and Energy levels (eV)...' selected. A table window is open, showing the data for 10 levels. The table has columns for 'Znl', 'Enl, eV', and 'Level'. The data is as follows:

	Znl	Enl, eV	Level
1	12.3451	1500.369	1s
2	10.1108	103.81814	2s
3	8.10261	66.81906	2p
4	6.62813	6.636544	3s
5	1.1082	3.3973908	3p
6	1.00037	1.5175642	3d
7	2.96776	2.2700086	4s
8	1.95914	1.5079964	4p
9	1.00523	0.8538336	4d
10	1.0	0.8503832	4f

The status bar at the bottom of the window shows: 'Effective Nuclear Charge and Energy levels (eV) (8344, 16)', 'Compound/Vdata, 21', and 'Number of attributes = 0'.

Рис. 8. Структура данных для нейтрального иона алюминия

держатся энергия конфигурации в эВ, её статистический вес и числа заполнения уровней. Набор данных для хранения конфигураций может быть дополнен. В атрибут "Number of Configuration" набора данных записывается количество конфигураций для данной степени ионизации. Для хранения конфигурации создается строка данных составного типа (compound). Длина строки данных определяется главным квантовым числом. Описание записи в набор данных приведено в таблице 6.

Таблица 6: Структура записи набора данных  
Configuration Description

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	NameEQ	REAL	Configuration Energy, eV	энергия конфигурации в эВ
2	NameGQ	REAL	Stat.Weight of Configuration	статистический вес
3	name_id(1)	INTEGER	1s	число заполнения
4	name_id(2)	INTEGER	2s	число заполнения
5	name_id(3)	INTEGER	2p	число заполнения
...	...	...	...	...

Названия полей структуры находятся в файле 'QDinfo.inc':

```

INTEGER(HID_T) :: grQD_id
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameQD = "Configuration Description"
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameAttQD = "Number of Configuration"
INTEGER(HID_T) :: crp_list ! Dataset creation property identifier
INTEGER(HSIZE_T), DIMENSION(1) :: maxdims
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameEQ = "Configuration Energy, eV"
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameGQ = "Stat.Weight of
Configuration"

```

На рис. 9 приведено описание возбужденных конфигураций для нейтрального иона алюминия. Из строки атрибута можно видеть число конфигураций в базе.

Configuration Description at /Al0/ [DBA\_Al.h5 in C:\H5DB]

	Configuration E...	Stat. Weigh...	1s	2s	2p	3s	3p	3d
1	-6589.364	6.0	2	2	6	2	1	0
2	-6583.351	30.0	2	2	6	1	2	0
3	-6575.468	20.0	2	2	6	0	3	0
4	-6585.382	10.0	2	2	6	2	0	1
5	-6578.92	120.0	2	2	6	1	1	1
6	-6570.59	150.0	2	2	6	0	2	1
7	-6573.105	90.0	2	2	6	1	0	2
8	-6564.325	270.0	2	2	6	0	1	2

Configuration Description (60360, 16)  
 Compound/Vdata, 191  
 Number of attributes = 1  
 Number of Configuration = 191

Рис. 9. Описание конфигураций нейтрального иона алюминия

#### 2.4.5 Описание переходов внутри иона

Набор атомных данных Transition Description содержит описание переходов между конфигурациями одной степени ионизации. В базе данных содержатся номера конфигураций, энергия перехода в эВ, сила осциллятора и гауссово уширение для линии (в случае базы по среднему атому вычисляется в приближении Мошковского). Набор данных для хранения переходов может быть дополнен. В атрибут "Number of Transition" набора данных записывается количество переходов между ионами с данной степенью ионизации. Для хранения перехода создаётся строка данных составного типа (compound). Описание записи в набор данных приведено в таблице 7.



Таблица 7: Структура записи набора данных  
Transition Description

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	QTName(1)	INTEGER	Q initial	номер конфигурации, из которой происходит переход
2	QTName(2)	INTEGER	Q final	номер конфигурации, в которую происходит переход
3	QTName(3)	REAL	omega, eV	энергия перехода в эВ
4	QTName(4)	REAL	gf	сила осциллятора перехода
5	QTName(5)	REAL	Gauss, eV	уширение линии
6	QTName(6)	CHARACTER*10	'Transition Info'	описание для одно-электронных переходов

Названия полей структуры находятся в файле 'QTinfo.inc':

```

INTEGER(HID_T) :: plist_id ! Dataset transfer property
INTEGER(HID_T) :: crp_list ! Dataset creation property identifier
INTEGER(HSIZE_T), DIMENSION(1) :: maxdims
INTEGER(HID_T) :: memData_id(6) ! Memory datatype identifier
INTEGER(HID_T) :: data_type(6);
INTEGER(SIZE_T) :: type_size(6) ! Size of the datatype
character(LEN=*), PARAMETER :: QTName(6) = (' Q initial', 'Q final', &
'omega, eV ', 'gf', 'Gauss, eV', &
'Transition Info')
CHARACTER(LEN=10), allocatable, dimension(:) :: QTnl1
INTEGER, PARAMETER :: qtLenInfo = 10

```

На рис. 10 приведено описание переходов между конфигурациями в нейтральном ионе алюминия. Из строки атрибута можно видеть число переходов в базе. В случае если нет переходов (для полностью ионизованного вещества), данный набор не создаётся.

Transition Description at /Al0/ [DBA\_Al.h5 in C:\H5DB]

	Q init...	Q final	omega, eV	gf	Gauss, eV	Transitio...
1	1	2	6.0127	18.2367	0.68112	3s - 3p
2	1	4	3.98193	8.48302	0.0	3p - 3d
3	1	9	2.64453	1.94337	0.0	3p - 4s
4	1	17	10.0918	0.69125	0.591565	3s - 4p
5	1	25	4.70557	1.45564	0.0	3p - 4d
6	1	49	4.25879	0.113867	0.0	3p - 5s
7	1	51	5.04199	0.524552	0.0	3p - 5d
8	1	54	4.83691	0.0342777	0.0	3p - 6s
9	1	56	5.22168	0.254034	0.0	3p - 6d
10	1	61	11.1548	0.143622	0.610696	3s - 5p

Transition Description (81508, 18)  
Compound/Vdata, 889  
Number of attributes = 1

Log Info Metadata

Рис. 10. Описание переходов между конфигурациями в нейтральном ионе алюминия

#### 2.4.6 Описание ионизационных переходов

Набор атомных данных Ionization Transition содержит описание ионизационных переходов между конфигурациями. В базе данных содержатся номера конфигураций, энергия перехода в эВ, описание уровня, с которого происходит ионизация (квантовые числа и число заполнения). Набор данных для хранения переходов может быть дополнен. В атрибут "Number of Ionization Transition" набора данных записывается количество ионизационных переходов для конфигураций с данной степенью ионизации. Для хранения перехода создаётся строка данных составного типа (compound). Описание записи в набор данных приведено в таблице 8.

Таблица 8: Структура записи набора данных  
Ionization Transition

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	PHName(1)	INTEGER	Q initial	номер конфигурации, из которой происходит ионизация
2	PHName(2)	INTEGER	Q final	номер конфигурации, в которую происходит рекомбинация
3	PHName(3)	INTEGER	Nnl	число заполнения уровня
4	PHName(4)	REAL	omega, eV	энергия ионизации в эВ
5	PHName(5)	CHARACTER*3	level	уровень, с которого происходит ионизация

Названия полей структуры находятся в файле 'PHinfo.inc':

```

INTEGER(HID_T) :: plist_id ! Dataset transfer property
INTEGER(HID_T) :: crp_list ! Dataset creation property identifier
INTEGER(HSIZE_T), DIMENSION(1) :: maxdims
INTEGER(HID_T) :: memData_id(5) ! Memory datatype identifier
INTEGER(HID_T) :: data_type(5);
INTEGER(SIZE_T) :: type_size(5) ! Size of the datatype
CHARACTER (LEN=*), PARAMETER :: PHName(5) = (' Q initial', 'Q final',
'Nnl', & 'omega, eV ', 'level')
CHARACTER(LEN=3), allocatable, dimension(:) :: PHnl1
INTEGER, PARAMETER :: phLenInfo = 3

```

На рис. 11 приведено описание ионизационных переходов для нейтрального иона алюминия. Из строки атрибута можно видеть число переходов в базе. В случае если нет переходов (для полностью ионизованного вещества), данный набор не создаётся.

Ionization Transition at /Al0/ [DBA\_Al.h5 in C:\H5DB]

	Q initial	Q final	Nnl	omega, eV	level
1	1	1	1	3.4720063	3p
2	1	2	2	8.982	3s
3	1	3	6	85.964066	2p
4	2	2	2	2.9689925	3p
5	2	4	1	10.403012	3s
6	2	5	6	88.30402	2p
7	3	4	3	2.52	3p
8	4	6	2	12.701011	3s
9	4	7	6	91.80295	2p
10	5	6	1	6.239004	3p

Ionization Transition (111066, 18)  
Compound/Vdata, 415  
Number of attributes = 1

Рис. 11. Описание ионизационных переходов из конфигураций нейтрального иона алюминия

#### 2.4.7 Описание автоионизационных переходов

Набор атомных данных AutoIonization Transition содержит описание ионизационных переходов между конфигурациями. В базе данных содержатся номера конфигураций, энергия перехода в эВ, описание уровня, с которого происходит ионизация (квантовые числа и число заполнения). Набор данных для хранения переходов может быть дополнен. В атрибут "Number of AutoIonization Transition" набора данных записывается количество ионизационных переходов для конфигураций с данной степенью ионизации. Для хранения перехода создаётся строка данных составного типа (compound). Описание записи в набор данных приведено в таблице 9.

Таблица 9: Структура записи набора данных  
AutoIonization Transition

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	AIName(1)	INTEGER	Q intermediate	номер промежуточной конфигурации, из которой происходит ионизация
2	AIName(2)	INTEGER	Q initial	номер автоионизационной конфигурации
3	AIName(3)	REAL	omega,eV	энергия распада в эВ
4	AIName(4)	REAL	gf	сила осциллятора
5	AIName(5)	REAL	g intermediate	статистический вес промежуточной конфигурации
6	AIName(6)	REAL	g initial	статистический вес автоионизационной конфигурации
7	AIName(7)	INTEGER	Q final	конфигурация, в которую происходит ионизация
8	AIName(8)	INTEGER	n	квантовые числа уровня, с которого происходит ионизация
9	AIName(9)	INTEGER	l	
10	AIName(10)	REAL	EnergyPH, eV	энергия ионизации в эВ
11	AIName(11)	REAL	g final	статистический вес конечной конфигурации

Названия полей структуры находятся в файле 'AIinfo.inc':

```

INTEGER(HID_T) :: plist_id ! Dataset trasfer property
INTEGER(HID_T) :: crp_list ! Dataset creation property identifier
INTEGER(HSIZE_T), DIMENSION(1) :: maxdims
INTEGER(HID_T) :: memData_id(11) ! Memory datatype identifier
INTEGER(HID_T) :: data_type(11);
INTEGER(SIZE_T) :: type_size(11) ! Size of the datatype
CHARACTER (LEN=*), PARAMETER :: AIName(11) =(/ &
' Q intermediate ', 'Q initial', 'omega, eV ', &
'gf', 'g intermediate ', 'g initial ', &
'Q final ', 'n', 'l', 'EnergyPH, eV', 'g final '/')
INTEGER(SIZE_T) :: type_size_all ! Size of the datatype
INTEGER(SIZE_T) :: offset ! Member's offset
INTEGER(HID_T) :: dtype_id ! Compound datatype identifier

```

На рис. 12 приведено описание автоионизационных переходов для иона алюминия  $Al^{+11}$ . Из строки атрибута можно видеть число автоионизационных переходов в базе. В случае если нет переходов (для водородоподобного иона и полностью ионизованного вещества), данный набор не создаётся.

## 2.5 Структура детальной базы данных

В базе для конкретного вещества с заданным зарядом ядра и атомным весом хранится детальная информация о конфигурациях и переходах, полученная с помощью атомных программ или из эксперимента. Детальная база данных, так же как и база по среднему атому, содержит группы, соответствующие степеням ионизации вещества. Общая структура базы данных по среднему атому приведена в таблице 10. В детальной базе не хранятся потенциалы ионизации и ещё ряд величин.

Таблица 10: Структура детальной базы данных

Название	Что содержит	Как хранится	Примечание
Atomic Data	Атомные данные	DATASET	атомный номер и вес
History DB correction	История изменений базы данных	DATASET	пополняемый набор данных
#sub #k	Информация по ионам с кратностью ионизации k	GROUP	информация о некоторых ионах может отсутствовать

AutoIonization Transition at /Al11/ [DBA\_Al.h5 in C:\H5DB]

	Q interm...	Q ini...	omega, eV	gf	g inter...	g initial	Q final	n	l	EnergyPH, eV	g final
1	2	5	1715.66	2.88288	4.0	12.0	1	2	0	1211.48	2.0
2	4	6	1713.43	7.2072	12.0	15.0	1	2	1	1221.72	2.0
3	7	9	1729.54	2.88288	4.0	12.0	1	3	0	1509.89	2.0
4	2	12	2013.49	0.575804	4.0	12.0	1	2	0	1509.32	2.0
5	4	13	2004.05	1.72741	12.0	36.0	1	2	1	1512.34	2.0
6	11	13	1728.42	8.64864	12.0	36.0	1	3	1	1512.34	2.0
7	7	14	2039.2	0.575804	4.0	12.0	1	3	0	1819.55	2.0
8	11	15	2038.65	1.43951	12.0	15.0	1	3	1	1822.56	2.0
9	16	18	1731.03	14.4144	20.0	60.0	1	3	2	1516.87	2.0
10	16	20	2039.52	2.87902	20.0	60.0	1	3	2	1825.36	2.0

AutoIonization Transition (1085673, 18)  
Compound/Vdata, 136  
Number of attributes = 1

Рис. 12. Описание автоионизационных переходов в ионе алюминия  $Al^{+11}$

На рис. 13 приведён образец структуры детальной базы данных для алюминия: группы по степеням ионизации, набор атомных данных и описание истории изменений базы.

Набор атомных данных AtomicData аналогичен записи в базе данных по среднему атому (см. таблицу 2). Максимальное главное квантовое число  $n_{\max}$  записано как атрибут базы  $N_{\max}DB = \text{"Main principal numbers } n_{\max}\text{"}$ . Описание всех изменений базы данных хранится в пополняемом наборе данных "History DB Correction" в виде строковых констант длиной 256 символов.

### 2.5.1 Детальное описание переходов

Набор атомных данных Level Transition содержит детальное описание переходов между конфигурациями одной степени ионизации. В базе данных содержатся номера конфигураций и их подуровней, энергия перехода в эВ, сила осциллятора. Набор данных для хранения переходов может быть дополнен. В атрибуте записано примечание, что для силы осциллятора в базе хранится логарифмическое значение. Для хранения перехода создаётся строка данных составного

The screenshot displays the HDFView 2.10.1 interface. On the left, a tree view shows the file structure: DBDet\_Al.h5 containing folders A10 through A19, AtomicData, and History DB Correction. The main window shows a text view of the History DB Correction with the following entries:

Index	Description
1	FAC 18/12/2009 : corrected to experimental ionization levels from C.Allen Astrophysical Quantities
2	The First Correction of DB: data
3	The Second correction of DB: data

Below the text view, a table view of AtomicData is shown for Aluminum (Atomic Number 13.0, Atomic Weight 26.98154). The bottom pane displays metadata: (96) Group size = 16, Number of attributes = 1, Main principal numbers  $n_{\max} = 6$ .

Рис. 13. Образец структуры детальной базы данных для алюминия

типа (compound). Описание записи в набор данных приведено в таблице 11.

Таблица 11: Структура записи набора данных Level Transition

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	LTName(1)	INTEGER	Q initial	номер конфигурации, из которой происходит переход
2	LTName(2)	INTEGER	Q final	номер конфигурации, в которую происходит переход
3	LTName(3)	INTEGER	Level initial	номер уровня конфигурации, из которой происходит переход
4	LTName(4)	INTEGER	Level final	номер уровня конфигурации, в которую происходит переход
5	LTName(5)	REAL	Photon Energy, eV	энергия перехода в эВ
6	LTName(6)	REAL	log10(gf)	логарифм силы осциллятора перехода

Названия полей структуры находятся в файле 'LTinfo.inc':

```

INTEGER(HID_T) :: plist_id ! Dataset trasfer property
INTEGER(HID_T) :: crp_list ! Dataset creation property identifier
INTEGER(HID_T) :: GrLT_id ! Group identifier
INTEGER(HSIZE_T), DIMENSION(1) :: maxdims
INTEGER(SIZE_T) :: type_size_all ! Size of the datatype
INTEGER(HID_T) :: memData_id(6) ! Memory datatype identifier
INTEGER(HID_T) :: data_type(6);
INTEGER(SIZE_T) :: type_size(6) ! Size of the datatype
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: LTName(6) = ('Q Initial', 'Q Final', &
'Level Initial', 'Level Final', 'Photon Energy, eV', 'log10(gf)')
INTEGER, PARAMETER :: AttLTLenInfo = 15
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameLT = 'Detailed Transition
Description'
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameAttLT = "Attention!"
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: AttLTinfo='log10 scale for gf'

```

На рис. 14 приведено описание переходов между конфигурациями в  $Al^{+3}$ . В случае если нет переходов (для полностью ионизованного вещества), данный набор не создаётся.

## 2.5.2 Группа иона

В каждой из групп, соответствующих фиксированной кратности ионизации  $k$ , содержится группа с описанием конфигураций и тонкой структуры уровней, а также возможные радиационные переходы. Структура группы для заданного иона приведена в таблице 12.

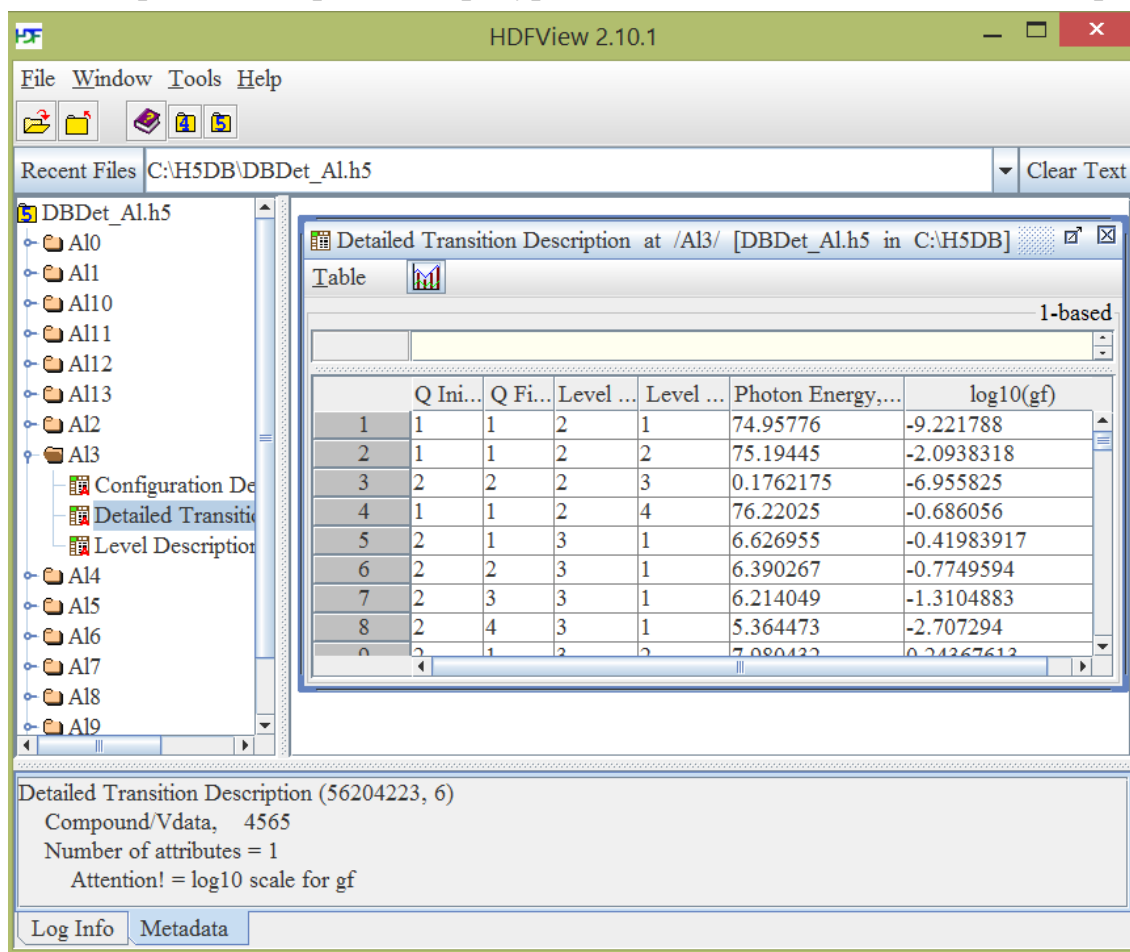


Таблица 12: Структура группы данных для фиксированного иона

Название	Что содержит	Как хранится	Примечание
Configuration Description	Описание конфигураций	DATASET	описание конфигураций аналогично среднему атому (см. таблицу б.)
Level Description	Уровни конфигурации	DATASET	описание уровней
Level Transition	Детализация линий	DATASET	описание переходов

### 2.5.3 Описание структуры уровней

Набор атомных данных Level Description содержит детальное описание структуры уровней. В базе данных содержатся номер конфигурации, номер уровня, статистический вес уровня, энергия уровня в эВ (по отношению к средней энергии конфигурации основного состояния), описание уровня (спектроскопическое название, если есть данные). Набор данных может быть дополнен. В атрибут "Ground Configuration Energy, eV" набора данных записывается средняя энергия конфигурации основного состояния. Для хра-

Рис. 14. Описание переходов между конфигурациями в ионе Al<sup>3+</sup>

нения перехода создаётся строка данных составного типа (compound). Описание записи в набор данных приведено в таблице 13.

Таблица 13: Структура записи набора данных Level Description

№ п.п	Название поля структуры	Тип данных структуры	Название	Примечание
1	LDName(1)	INTEGER	Configuration	номер конфигурации
2	LDName(2)	INTEGER	Level	номер уровня
3	LDName(3)	INTEGER	Stat.Weight	2J+1 статистический вес уровня
4	LDName(4)	REAL	E-E(Ground), eV	энергия ионизации в эВ
5	PHName(5)	CHARACTER*3	Level Info	уровень, с которого происходит ионизация

Названия полей структуры находятся в файле 'LDinfo.inc':

```

INTEGER(HID_T) :: plist_id ! Dataset trasfer property
INTEGER(HID_T) :: crp_list ! Dataset creation property identifier
INTEGER(HID_T) :: GrLD_id ! Group identifier
INTEGER(HSIZE_T), DIMENSION(1) :: maxdims
INTEGER(SIZE_T) :: type_size_all ! Size of the datatype
INTEGER(HID_T) :: memData_id(5) ! Memory datatype identifier
INTEGER(HID_T) :: data_type(5);
INTEGER(SIZE_T) :: type_size(5) ! Size of the datatype
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: LDName(5) = ('Config ', 'Level', &
'Stat.Weight ', 'E-E(Ground), eV', 'Level Info')
INTEGER, PARAMETER :: LDLenInfo = 15
CHARACTER (LEN=*), PARAMETER :: NameLD = 'Level Description'
CHARACTER(LEN=*), PARAMETER :: NameAttLD = "Ground Configuration
Energy, eV"

```

На рис. 15 приведено описание структуры уровней иона алюминия  $Al^{+3}$ . В строке атрибута прописана энергия основной конфигурации.

#### 2.5.4 Усреднение детальных баз данных

Как уже было сказано выше, использование полной базы данных при решении уравнений кинетики может привести к неоправданно большому времени счёта. Число уравнений может быть несколько сотен тысяч и более. В то же время на практике детальная кинетика может оказаться ненужной. Потребовалось создание инструментов, которые из детальной базы данных формировали бы некоторые промежуточные (упрощённые) базы в соответствии с решаемой задачей.

В частности, при решении кинетических уравнений может использоваться обобщённая (усреднённая) информация о переходах

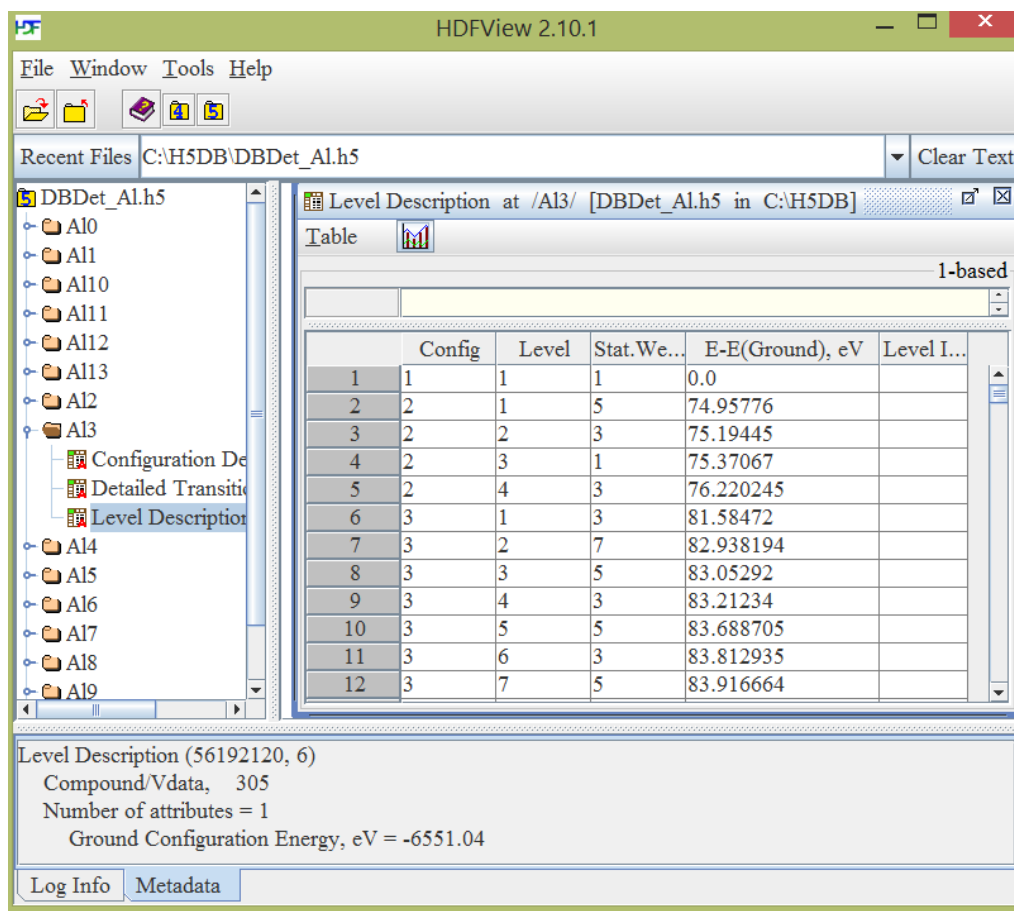


Рис. 15. Описание структуры уровней в Al<sup>3+</sup>

между конфигурациями. Однако последующий расчёт спектров требует использования базы в детальном виде.

В детальной базе переход между двумя конфигурациями может содержать десятки и даже сотни тысяч спектральных линий в различных интервалах энергий фотонов. Для уменьшения их количества, состояния с одним возбуждённым электроном на верхних оболочках объединяются в суперсостояние, описываемое главным квантовым числом возбуждённой оболочки. Кроме того, проводится обрезание высоковозбужденных конфигураций, спектр которых не попадает в заданный интервал. Далее спектр сворачивается с заданной точностью по методике RUSAM (см. раздел 3.4).

Таким образом, под конкретную задачу формируется временная база данных с заданными параметрами усреднения. Эти параметры заносятся в описание результатов, и, в случае необходимости, расчёт можно будет повторить или скорректировать.

## 2.6 Коррекция и верификация данных

Первоначальная коррекция базы данных связана с уточнением положения спектральных линий. Как уже упоминалось выше, для по-

лучения детальной информации по спектральным линиям проводятся расчёты по программам FAC и RCG. После проведения расчётов для интересующих ионов необходимо уточнить положение и силу линий.

Пусть имеются файлы, содержащие детальную, но далеко не полную информацию для некоторых ионов  $k$ -й степени кратности. Требуется найти такие же ионы в корректируемой базе данных и создать группы (LD, LT) для наборов данных, содержащих уточняющую информацию. Используя эту информацию, корректируются энергии конфигураций, положения линий и силы осцилляторов в основной базе.

Как правило, энергия ионизации нескольких первых состояний известна из эксперимента. Существуют инструменты, позволяющие провести корректировку энергий, чтобы энергии ионизации первых ионов совпадали с экспериментальными значениями.

Зачастую на практике требуется вычислить спектр излучения плазмы в диапазоне энергий фотонов, который находится за рамками стандартной базы данных. В этом случае проводится дополнение базы данных с тем же максимальным главным квантовым числом с использованием специально сформированного списка возбуждённых конфигураций. В этом случае в сформированной ранее базе происходит добавление информации о состояниях и линиях, полученных в дополнительном расчёте с учётом нового списка конфигураций. При этом в параметрах вычисления базы данных просто указывается, что происходит её дополнение.

### 3 Спектральные коэффициенты поглощения и излучения

При решении задач радиационной газовой динамики корректное описание физических процессов, происходящих в плазме, требует решения уравнения переноса излучения:

$$(\vec{\Omega} \cdot \nabla) I_{\omega} = j_{\omega}(I_{\omega}) - \kappa_{\omega}(I_{\omega}) I_{\omega}. \quad (21)$$

Здесь  $I_{\omega} = I_{\omega}(\vec{r}, \vec{\Omega})$  – плотность мощности излучения на частоте  $\omega$  в телесный угол  $\vec{\Omega}$  в точке с радиус-вектором  $\vec{r}$ ,  $\kappa_{\omega} = \kappa_{\omega}(I_{\omega})$  – коэффициент поглощения,  $j_{\omega} = j_{\omega}(I_{\omega})$  – излучательная способность вещества,  $\vec{\Omega}$  – единичный вектор в направлении  $\Omega$ . Излучательная способность и коэффициент поглощения зависят как от температуры и плотности

вещества, так и от поля излучения  $I_\omega$  (точнее от спектральной плотности излучения  $J_\omega = \int I_\omega d\Omega$ ).

Свойства плазмы определяются её составом и населённостями возбуждённых состояний, или, другими словами, количеством ионов с ионизацией степени  $k$  в состоянии  $s$ ; мы обозначим это число  $n_{ks} = n_{ks}(\vec{r}, t)$ . Для вычисления характеристик плазмы необходимо знать относительные концентрации ионов  $x_{ks} = n_{ks} / n_a$ , где  $n_a = \rho N_A / A$  – плотность тяжёлых частиц (ионов и атомов),  $\rho$  – плотность вещества,  $N_A$  – число Авогадро и  $A$  – атомный вес.

Коэффициент поглощения фотонов  $\kappa'(\omega)$  и радиационные потери  $j'(\omega)$  в плазме определяются следующими формулами [8]:

$$\kappa'(\omega) = n_a a_0^2 \left\{ \sum_{ks, ks'} x_{ks} \sigma_{ksks'}^{bb}(\omega) + \sum_{ks} x_{ks} \sigma_{ks}^{bf}(\omega) + \sigma^{ff}(\omega) \right\}, \quad (22)$$

$$j'(\omega) = n_a a_0^2 \left\{ \sum_{ks'ks} x_{ks'} \sigma_{ks'ks}^{bb}(\omega) + \sum_{ks} x_{ks} \sigma_{ks}^{fb}(\omega) + e^{-\omega/\theta} \sigma^{ff}(\omega) \right\} \left( \frac{\omega^3}{4\pi^3 c^2} + I_\omega \right), \quad (23)$$

где  $c = 137,036$  – скорость света в атомных единицах,  $a_0 = 5,291772 \cdot 10^{-9}$  см – борковский радиус. При вычислении спектральных коэффициентов учитываются сечения процессов поглощения/излучения в линиях  $\sigma_{ksks'}^{bb}(\omega)$ , фотоионизации/фоторекомбинации  $\sigma_{ks}^{bf/fb}(\omega)$  и тормозного поглощения  $\sigma^{ff}(\omega)$  соответственно, а суммирование проводится по всем конфигурациям  $Q_{ks}$ .

При решении уравнения переноса излучения в формулах (22) – (23) часть излучательной способности  $j'(\omega)$ , связанную с вынужденным излучением и пропорциональную  $I_\omega$ , необходимо перенести в коэффициент поглощения  $\kappa'(\omega)$ . Заметим также, что в расчетах не рассматриваются процессы рассеяния.

Приведенное сечение поглощения в линиях вычисляется по формуле

$$\sigma_{ks,ks'}^{bb} = 2\pi^2 \alpha f_{ks,ks'} \Phi_{ks,ks'}(\omega),$$

где  $\alpha = 1/137.036$  – постоянная тонкой структуры,  $f_{ks,ks'}$  – сила осциллятора перехода между состояниями

$ks \rightarrow ks'$ : ( $g_{ks} f_{ks,ks'} = g_{ks'} f_{ks',ks}$ ),  $\Phi_{ks,ks'}(\omega)$  – профиль спектральной линии. Обычно для простоты предполагается, что при излучении и поглощении происходит полное перераспределение по частотам внутри спектральной линии, поэтому можно считать  $\Phi_{ks,ks'}^{abs}(\omega) = \Phi_{ks',ks}^{em}(\omega) = \Phi_{ks,ks'}(\omega)$ .

Сечения фотоионизации и тормозного поглощения могут быть вычислены с использованием приближения Крамерса. При этом сечение фотоионизации для конфигурации  $ks$  с числами заполнения  $N_{n\ell}^{ks}$  определяется суммой

$$\sigma_{ks}^{bf}(\omega) = N_{n\ell}^{ks} \sum_{n\ell} \frac{64\pi\alpha}{3\sqrt{6}} \frac{Z_{n\ell}^k |E_{n\ell}^{ks}|^{3/2}}{2n^2} \frac{1}{\omega^3},$$

где  $Z_{n\ell}^k$  – эффективный заряд ядра для уровня  $n\ell$ ,  $E_{n\ell}^{ks}$  – энергия ионизации уровня  $n\ell$  в конфигурации  $ks$ .

Сечение тормозного поглощения определяется через среднюю степень ионизации плазмы  $Z_0 = \sum_{ks} kx_{ks}$  и химический потенциал свободных электронов  $\zeta$ , которые, как предполагается, находятся в равновесии:

$$\sigma^{ff}(\omega) = \frac{16\pi\alpha}{3\sqrt{3}} Z_0^2 \theta \exp(\zeta / \theta) \frac{1}{\omega^3}.$$

Из условия постоянной плотности свободных электронов можно получить соотношение

$$\frac{Z_0}{(4/3)\pi r_0^3} = \frac{(2\theta)^{3/2}}{2\pi^2} I_{1/2}(\zeta / \theta),$$

что в случае невырожденной плазмы при использовании асимптотики для функции Ферми-Дирака  $I_{1/2}(x) \approx \frac{1}{2} \sqrt{\pi} e^x$  даёт выражение

$$\exp(\zeta / \theta) \approx 0,7 \frac{Z_0 \rho}{A\theta^{3/2}}.$$

Давление  $P$  и энергия  $E$  вычисляется по формулам идеального бoльцмановского газа с учётом затрат на ионизацию:

$$P = (Z_0 + 1) \frac{\theta}{v}, \quad E = \frac{3}{2} (Z_0 + 1) \theta + \sum_{ks} x_{ks} (E_{ks} - E_{00}).$$

Здесь  $v = \frac{4}{3} \pi r_0^3$  – объем атомной ячейки. Радиус атомной ячейки при заданной плотности вещества

$$r_0 = \frac{1}{a_0} \left( \frac{3}{4\pi} \frac{A}{\rho N_A} \right)^{1/3}. \quad (24)$$

### 3.1 Модель Саха: равновесная плазма

В случае идеальной равновесной плазмы для вычисления её состава и термодинамических функций широко используется модель ионизационного равновесия (уравнения Саха-Больцмана). Систему уравнений этой модели для концентраций  $x_{ks}$  получают, исходя из распределения Гиббса и используя в качестве подсистемы сферическую атомную ячейку с радиусом  $r_0$ :

$$Z_0 \frac{x_{k+1,p}}{x_{ks}} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} r_0^3 \theta^{3/2} \frac{g_{k+1,p}}{g_{ks}} \exp\left(-\frac{E_{k+1,p} - E_{ks}}{\theta}\right).$$

Кроме того, требуется выполнение условий нормировки и электронной нейтральности

$$\sum_{ks} x_{ks} = 1, \quad \sum_{ks} k x_{ks} = Z_0.$$

Энергии и статистические веса для конфигураций, входящие в эту систему уравнений, берутся из базы данных. Для решения системы используется метод, описанный в [8].

Модель ионизационного равновесия применима, как следует из её вывода, при достаточно малых плотностях вещества. Отметим два обстоятельства, ограничивающие область применимости модели. Во-первых, энергии состояний с двумя возбуждёнными электронами могут вычисляться с большой погрешностью. Во-вторых, с ростом плотности вещества уровни энергии смещаются и могут не соответствовать данным, вычисленным в общем случае для свободных ионов. При дальнейшем увеличении плотности необходимо учесть снижение потенциала ионизации, а также принять во внимание возможное ис-

чезновение слабосвязанных дискретных уровней (их переход в непрерывный спектр). Заметим, что при таких условиях справедливость приближения Саха – Больцмана нарушается.

### 3.2 Столкновительно-излучательная модель плазмы

Исследование горячей плазмы, полученной на разрядных или лазерных установках, требует учитывать её неравновесный характер из-за процессов нестационарной ионизации (рекомбинации) и поля излучения. Существует несколько подходов к этой проблеме [34]. В дополнение к приближению локального термодинамического равновесия часто прибегают к так называемому корональному равновесию, в котором ионы рассматриваются в основном состоянии и все столкновительные возбуждения быстро снимаются путём радиационного распада, поскольку плазма полностью прозрачна. Более общим является квазистационарное приближение, в котором излучение предполагается известным, например, это планковское поле с некоторой температурой, не совпадающей с температурой электронов. Наиболее общей моделью является модель столкновительно-излучательного равновесия, в которой поле излучения должно быть согласовано с поуровневой кинетикой для некоторой заданной конфигурации неравновесной плазмы.

В модели столкновительно-излучательного равновесия концентрации  $x_{ks}$  состояний ионов  $Q_{ks}$  удовлетворяют системе уравнений поуровневой кинетики

$$\begin{aligned} \frac{dx_{ks}}{dt} = & -x_{ks} \left( \sum_{s'} R_{ks \rightarrow k-1, s'} + \sum_{s'} I_{ks \rightarrow k+1, s'} + \sum_{s'} T_{ks \rightarrow ks'} \right) + \\ & + \sum_{s'} x_{k+1, s'} R_{k+1, s' \rightarrow j, s} + \sum_{s'} x_{k-1, s'} I_{k-1, s' \rightarrow j, s} + \sum_{s'} x_{ks'} T_{ks' \rightarrow ks}. \end{aligned} \quad (25)$$

Скорость рекомбинации иона из состояния  $Q_{ks}$  в состояние  $Q_{k-1, s'}$  имеет вид

$$\begin{aligned} R_{ks \rightarrow k-1, s'} = & \alpha^{ir}(ks \rightarrow k-1, s') + \alpha^{phr}(ks \rightarrow k-1, s') + \\ & + \alpha^{dc}(ks \rightarrow k-1, s'), \end{aligned} \quad (26)$$

где  $\alpha^{ir}(ks \rightarrow k-1, s')$ ,  $\alpha^{phr}(ks \rightarrow k-1, s')$  и  $\alpha^{dc}(ks \rightarrow k-1, s')$  – скорости трёхчастичной рекомбинации, фоторекомбинации и диэлектронного захвата соответственно, с переходом электрона из непрерывного спек-



тра на уровень с квантовыми числами  $n\ell$  (изменение заселённостей такое, что  $N_{n\ell}^{k-1,s'} = N_{n\ell}^{ks} + 1$ ).

Скорость ионизации из состояния  $Q_{ks}$  в состояние  $Q_{k+1,s'}$  даётся выражением

$$I_{ks \rightarrow k+1,s'} = \alpha^{ii}(ks \rightarrow k+1,s') + \alpha^{phi}(ks \rightarrow k+1,s') + \alpha^{ai}(ks \rightarrow k+1,s'), \quad (27)$$

где  $\alpha^{ii}(ks \rightarrow k+1,s')$ ,  $\alpha^{phi}(ks \rightarrow k+1,s')$  и  $\alpha^{ai}(ks \rightarrow k+1,s')$  – скорости ударной ионизации, фотоионизации и автоионизации с переходом электрона с квантовыми числами  $n\ell$  в непрерывный спектр ( $N_{n\ell}^{k+1,s'} = N_{n\ell}^{ks} - 1$ ).

Скорости переходов из состояния  $Q_{ks}$  в  $Q_{ks'}$  без изменения ионизации имеют вид

$$T_{ks \rightarrow ks'} = \begin{cases} \alpha^{ex}(ks \rightarrow ks') + \alpha^{abs}(ks \rightarrow ks'), & \text{если } E_{ks} < E_{ks'}, \\ \alpha^{dex}(ks \rightarrow ks') + \alpha^{em}(ks \rightarrow ks'), & \text{если } E_{ks} > E_{ks'}, \end{cases} \quad (28)$$

где  $E_{ks}$  – энергия состояния  $ks$ ,  $\alpha^{ex}(ks \rightarrow ks')$  и  $\alpha^{dex}(ks \rightarrow ks')$  – скорости возбуждения и гашения электронным ударом и  $\alpha^{abs}(ks \rightarrow ks')$ ,  $\alpha^{em}(ks \rightarrow ks')$  – скорости радиационного возбуждения (поглощения фотона) и излучения соответственно, с переходом электрона  $n\ell \rightarrow n'\ell'$  (для чисел заполнения имеем  $N_{n\ell}^{ks'} = N_{n\ell}^{ks} - 1$ ,  $N_{n'\ell'}^{ks'} = N_{n'\ell'}^{ks} + 1$ ).

Вероятности столкновительных процессов определяются соответствующими сечениями и концентрацией свободных электронов, а также их распределением по энергии. Вероятности радиационных процессов зависят не только от сечений, но и от функции распределения фотонов, точнее от того, насколько излучение поглощается (реабсорбируется) в плазме. Если значительная часть излучения поглощается, а условие локального термодинамического равновесия не выполняется, то уравнение переноса излучения и уравнения поуровневой кинетики должны решаться одновременно и самосогласованно.

### 3.3 Сечения и скорости процессов

Для расчёта скоростей элементарных процессов обычно используются формулы, полученные в работах [35–37]. В первом порядке теории возмущений наиболее универсальным подходом для расчёта

сечений столкновительных процессов является приближение искажённых волн и его модификации [35; 38].

Кроме того, используются формулы из статьи [21], где силы осцилляторов, уровни энергии и другие необходимые величины рассчитываются на основе модели самосогласованного поля Хартри-Фока-Слэтера [19; 20]. Скорости прямых и обратных процессов связаны принципом детального равновесия – в состоянии равновесия из этого условия должно следовать распределение Ферми-Дирака заселённости уровней для каждого из рассматриваемых процессов. Это даёт простую связь между скоростями прямых и обратных процессов.

С помощью программы FAS, кроме уровней энергии и параметров линий, можно вычислить сечения процессов. В инструкции к программе можно найти подробное описание методов расчёта. Для вычисления радиальных интегралов в пакете программ FAS возможно использование разных приближений:

- Coulomb-Born (CB) – радиальные интегралы получаются из таблицы обменных взаимодействий Golden и Sampson (1977, 1980);
- Distorted-Wave (DW) – интегралы вычисляются с использованием метода искажённых волн;
- Binary-Encounter-Dipole (BED) – используется теория Kim и Rudd (1994).

Ниже приведены интерполяционные формулы для сечений процессов, коэффициенты для которых могут быть в перспективе внесены в банк данных.

### 3.3.1 Скорости столкновительных процессов

Сечение возбуждения иона из состояния  $\mu$  в состояние  $\nu$  с возбуждением электрона с уровня  $n\ell$  на уровень  $n'\ell'$ , нормированное на один электрон, может быть представлено в виде [35; 39]:

$$\sigma_{\mu\nu}^{ex}(\varepsilon) = \sum_{\kappa} [\sigma'_{\kappa}(n\ell, n'\ell') + \sigma''_{\kappa}(n\ell, n'\ell')], \quad (29)$$

где  $\sigma'_{\kappa}(n\ell, n'\ell')$  включает прямую и непрямую части электрон-ионного взаимодействия,  $\sigma''_{\kappa}(n\ell, n'\ell')$  – член, отвечающий за обменное взаимодействие:

$$\sigma_{\kappa}(n\ell, n'\ell') = \frac{4\pi^3}{(2\ell+1)p^2} \sum_{\lambda, \lambda'} D_{n\ell, n'\ell'; \varepsilon\lambda, \varepsilon\lambda'}^{\kappa} \left( D_{n\ell, n'\ell'; \varepsilon\lambda, \varepsilon\lambda'}^{\kappa} - \sum_{\kappa'} E_{\varepsilon\lambda, n'\ell'; \varepsilon\lambda, \varepsilon\lambda'}^{\kappa\kappa'} \right), \quad (30)$$

$$\sigma_{\kappa'}(nl, n'l') = \frac{4\pi^3}{(2\ell+1)p^2} \sum_{\lambda, \lambda'} \left( \sum_{\kappa'} E_{\varepsilon\lambda, n'l'; nl, \varepsilon\lambda'}^{\kappa'\kappa} \right)^2. \quad (31)$$

Здесь  $p = (2\varepsilon)^{1/2}$  – импульс налетающего электрона;  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon'$  и  $\lambda$ ,  $\lambda'$  – энергии и орбитальные моменты электрона до и после столкновения,  $D_{nl, n'l'; \varepsilon\lambda, \varepsilon\lambda'}^{\kappa}$  и  $E_{\varepsilon\lambda, n'l'; nl, \varepsilon\lambda'}^{\kappa'\kappa}$  – прямые и обменные члены электронного взаимодействия, которые могут быть выражены через интегралы Слэтера  $R_{\alpha, \beta; \alpha', \beta'}^{(\kappa)}$  и  $3jm$ -,  $6j$ -символы Вигнера:

$$D_{nl, n'l'; \varepsilon\lambda, \varepsilon\lambda'}^{\kappa} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)}{2\kappa+1}} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa & \ell & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa & \lambda & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_{nl, n'l'; \varepsilon\lambda, \varepsilon\lambda'}^{(\kappa)}, \quad (32)$$

$$E_{\varepsilon\lambda, n'l'; nl, \varepsilon\lambda'}^{\kappa'\kappa} = (-1)^{\kappa+\kappa'} \sqrt{(2\kappa+1)(2\ell+1)(2\ell'+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa' & \lambda & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ \kappa & \lambda & \ell' \end{matrix} \right\} R_{\varepsilon\lambda, n'l'; nl, \varepsilon\lambda'}^{(\kappa')}. \quad (33)$$

Суммирование по  $\kappa$  и  $\kappa'$  в прямых и обменных интегралах определяется отличием от нуля соответствующих коэффициентов Вигнера. Максимальные значения орбитальных чисел  $\lambda$  и  $\lambda'$  ограничены существованием области классического движения электрона с данной энергией  $\varepsilon$  внутри атомной ячейки, т.е. максимальным значением  $\lambda_{max}$ , для которого ещё выполняется

$$2\varepsilon + 2V(r_0) - \frac{(\lambda_{max} + 1/2)^2}{r_0^2} > 0,$$

где  $r_0$  – радиус атомной ячейки,  $V(r)$  – межатомный потенциал. Следует отметить, что при высоких энергиях требуется учитывать 50 и более членов по  $\lambda$ ,  $\lambda'$  для того, чтобы получить приемлемые результаты, однако в этом случае могут быть использованы более простые формулы.

Так, для дипольных переходов с высокой энергией налетающего электрона можно значительно упростить (29), оставляя в сумме по  $\kappa$  только первый член. В результате получаем формулу Бете

$$\sigma_{\mu\nu}^{ex}(\varepsilon) = \frac{4\pi}{p^2 \omega_{\mu\nu}} f_{\mu\nu} \ln \frac{q_0}{p - p'}, \quad (34)$$

где  $\omega_{\mu\nu} = E_\nu - E_\mu$  – энергия перехода  $n\ell \rightarrow n'\ell'$ ,  $f_{\mu\nu}$  – сила осциллятора,  $q_0 = \min\{p + p', \sqrt{2|\varepsilon_{n\ell}|}\}$ .

Хотя формула Бете во многих случаях имеет большую погрешность, на её основе получена хорошо аппроксимирующая экспериментальные данные широко известная формула Режемортера [36]

$$\sigma_{\mu\nu}^{ex}(\varepsilon) = \frac{2\pi^2}{\sqrt{3}} \frac{f_{\mu\nu}}{\varepsilon \omega_{\mu\nu}} \chi(\varepsilon / \omega_{\mu\nu}), \quad (35)$$

где  $\varepsilon$  – энергия налетающего электрона,  $\chi(\varepsilon / \omega_{\mu\nu})$  – подгоночная функция.

В программе FAC для сечения процесса столкновительного возбуждения используется следующая формула

$$\sigma_{FAC}^{ex}(\varepsilon) = \frac{\pi}{k_0^2 g_\mu} a_0^2 \Omega_{\mu\nu}, \quad (36)$$

где  $k_0$  – кинетический момент налетающего электрона  $k_0^2 = 2\varepsilon \left(1 + \frac{\alpha^2}{2}\varepsilon\right)$ . Для интерполяции “силы столкновения”  $\Omega$  используются коэффициенты Бете в первом борновском приближении:

$$\Omega = b_0 \ln x + b_1, \quad (37)$$

где  $x = \frac{\varepsilon}{\omega_{\mu\nu}}$ ,  $\omega_{\mu\nu}$  – энергия перехода,  $b_0$  – коэффициент Бете. Для разрешённых и запрещённых переходов используются разные виды формул. Так, в случае дипольных и высших мультипольных разрешённых переходов

$$\Omega = p_0 \left(\frac{1}{x}\right)^{p_1} + p_2 \left(1 - \frac{1}{x}\right)^{p_3} + b_0 \ln x, \quad (38)$$

где  $p_0$ ,  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$  – параметры аппроксимации. В случае недипольных переходов  $b_0 = 0$ . Для запрещённых переходов

$$\Omega = p_0 x^{-2+p_1 \frac{1}{p_3+x} + p_2 \left( \frac{1}{p_3+x} \right)^2}. \quad (39)$$

Скорость столкновительных процессов, т.е. число актов возбуждения в единицу времени на ион, пропорциональна плотности электронов  $n_e$  ( $1/\text{см}^3$ ) и среднему от сечения  $\sigma_{\mu\nu}$ , умноженного на скорость электрона  $v = \sqrt{2\varepsilon}$ :

$$\alpha_{\mu\nu}^{ex} = n_e a_0^3 v_0 \langle \sigma_{\mu\nu}^{ex} v \rangle = 6,1 \cdot 10^{-6} n_e \int_{\omega_{\mu\nu}}^{\infty} \sqrt{2\varepsilon} \sigma_{\mu\nu}(\varepsilon) F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (40)$$

где  $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8}$  см – боровский радиус,  $v_0 = 4,13 \cdot 10^{16}$  1/с – атомная частота,  $F(\varepsilon)$  – функция распределения электронов (как правило, максвелловская с температурой  $\theta = kT$ ):

$$F(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\varepsilon} \theta^{-3/2} e^{-\varepsilon/\theta}.$$

Простая аналитическая аппроксимация для скорости возбуждения с использованием приближения Режемортера была предложена в [35]:

$$\alpha_{\mu\nu}^{ex} = 3,07 \cdot 10^{-8} n_e \frac{f_{\mu\nu} e^{-\omega_{\mu\nu}/\theta}}{\theta^{1/2} \omega_{\mu\nu}} \ln \left( 2 + \frac{1}{1,78 \omega_{\mu\nu} / \theta} \right). \quad (41)$$

Для обратного процесса девозбуждения принцип детального равновесия даёт:

$$\alpha_{\nu\mu}^{dex} = \frac{g_\nu}{g_\mu} e^{\omega_{\mu\nu}/\theta} \alpha_{\mu\nu}^{ex}. \quad (42)$$

Как видно из рис. 16, где приведена скорость возбуждения для перехода  $4d \rightarrow 5p$  в ионе  $\text{Xe}^{+10}$  при плотности  $\rho = 10^{-5}$  г/см<sup>3</sup> и различных температурах, формула Режемортера хорошо согласуется с результатами расчёта в приближении искажённых волн, в то время как приближение Борна даёт большую ошибку.

Выражения для столкновительной ионизации могут быть легко получены из (29), если предположить, что возбуждённый электрон будет находиться в непрерывном спектре. Тогда для сечения ионизации электрона с квантовыми числами  $n\ell$  (он переходит в состояние  $\varepsilon^* \lambda^*$ ) получаем

$$\sigma_{\mu\nu}^{ii}(\varepsilon) = \sum_{\lambda^*} \int_0^{(\varepsilon-\varepsilon^i)/2} \frac{d\sigma_{\mu\nu}^{ii}}{d\varepsilon^*} (1-n_{\varepsilon^*}) d\varepsilon^*, \quad (43)$$

где  $\varepsilon^i$  – энергия ионизации иона при переходе из состояния  $\mu$  в состояние  $\nu$ ,  $\varepsilon$  – энергия налетающего электрона,  $n_{\varepsilon} = \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \zeta}{\theta}\right)\right)^{-1}$  – функция распределения электронов с химическим потенциалом  $\zeta$ .

Дифференциальные сечения ионизации  $d\sigma_{\mu\nu}^{ii}$ , которые в (43) суммируются по орбитальному моменту  $\lambda^*$  и интегрируются по энергии  $\varepsilon^*$  ионизованного электрона, вычисляются аналогично (29):

$$d\sigma_{\mu\nu}^{ii} = \sum_{\kappa} \left[ d\sigma_{\kappa'}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) + d\sigma_{\kappa''}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) \right], \quad (44)$$

где

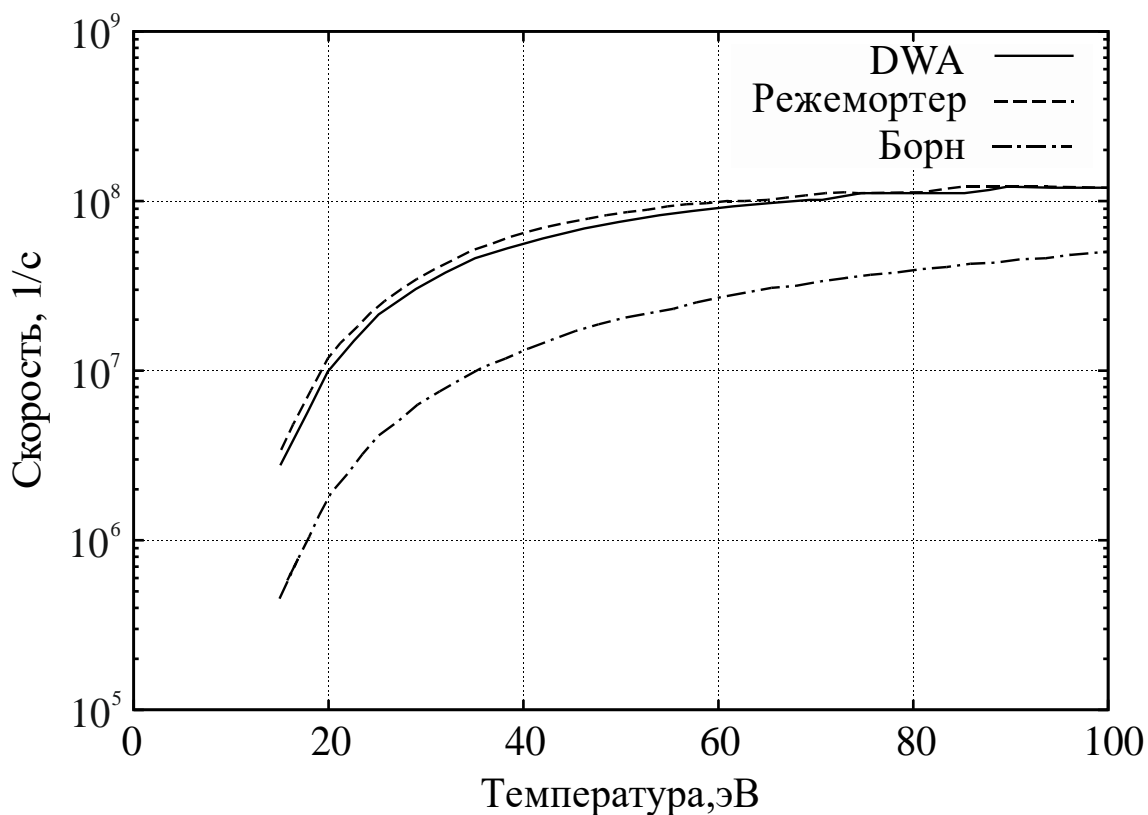


Рис. 16. Скорость возбуждения перехода  $4d \rightarrow 5p$  в ионе  $\text{Xe}^{+10}$  при плотности  $\rho = 10^{-5}$  г/см<sup>3</sup>, вычисленная с использованием метода искажённых волн (DWA), формулы Режеморттера и приближения Борна

$$d\sigma_{\kappa'}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) = \frac{4\pi^3}{(2l+1)k^2} \times \\ \times \sum_{\lambda, \lambda'} D_{nl, \varepsilon^* \lambda^*; \varepsilon \lambda, \varepsilon' \lambda'}^{\kappa} \times \left( D_{nl, \varepsilon^* \lambda^*; \varepsilon \lambda, \varepsilon' \lambda'}^{\kappa} - \sum_{\kappa'} E_{\varepsilon \lambda, \varepsilon^* \lambda^*; nl, \varepsilon' \lambda'}^{\kappa' \kappa} \right) d\varepsilon^*, \quad (45)$$

$$d\sigma_{\kappa''}(nl, \varepsilon^* \lambda^*) = \frac{4\pi^3}{(2l+1)k^2} \sum_{\lambda, \lambda'} \left( \sum_{\kappa'} E_{\varepsilon \lambda, \varepsilon^* \lambda^*; nl, \varepsilon' \lambda'}^{\kappa' \kappa} \right)^2 d\varepsilon^*. \quad (46)$$

Для скорости ионизации аналогично (40) имеем

$$\alpha_{\mu\nu}^{ii} = 6,1 \cdot 10^{-6} n_e \int_{\varepsilon^i}^{\infty} \left( \sum_{\lambda^*} \int_0^{(\varepsilon - \varepsilon^i)/2} \frac{d\sigma_{\mu\nu}^{ii}}{d\varepsilon^*} (1 - n_{\varepsilon^*}) d\varepsilon^* \right) \sqrt{2\varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (47)$$

Для скорости обратного процесса трёхчастичной рекомбинации получаем

$$\alpha_{\nu\mu}^{ir} = 1,17 \cdot 10^{-24} g_{\mu} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon^i/\theta} \alpha_{\mu\nu}^{ii}. \quad (48)$$

Простейшее приближение для сечения ионизации даёт классическая формула Томсона

$$\sigma_{\mu\nu}^T(\varepsilon) = \pi \frac{\varepsilon - \varepsilon^i}{\varepsilon^i \varepsilon^2}. \quad (49)$$

При высоких энергиях электронов хорошие результаты даёт приближение Борна

$$\sigma_{\mu\nu}^B(\varepsilon) \sim \frac{\ln(\varepsilon / \varepsilon^i)}{\varepsilon \varepsilon^i},$$

из которого получается формула Лютца для скорости ионизации [37]:

$$\alpha_{\mu\nu}^{ii} = 2 \cdot 10^{-7} n_e \frac{1}{\varepsilon^i} \int_{\varepsilon^i/\theta}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt = 2 \cdot 10^{-7} n_e \frac{E_1(\varepsilon^i / \theta)}{\varepsilon^i}, \quad (50)$$

где  $E_1(x)$  – интегральная экспонента:

$$E_1(x) = \int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt.$$

Как видно из рис. 17, где приведена скорость ионизации десятого иона олова  $\text{Sn}^{+9}$  в зависимости от температуры при плотности  $\rho = 10^{-5}$  г/см<sup>3</sup>, все рассмотренные приближения достаточно хорошо согласуются. В практических расчётах обычно используют простое приближение Лотца.

В программе FAC для интерполяции сечения процесса столкновительной ионизации используется формула

$$\sigma_{FAC}^{ii}(\varepsilon) = \frac{\pi}{k_0^2 g_\mu} a_0^2 \left( p_0 \left( \frac{1}{x} \right)^{p_1} + p_2 \left( 1 - \frac{1}{x} \right)^{p_3} + b_0 \ln x \right), \quad (51)$$

где  $g_\mu$  – статистический вес начального состояния,  $k_0$  – кинетический момент налетающего электрона,  $x = \varepsilon/\varepsilon^i$ ,  $p_0$ ,  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$  – параметры аппроксимации, которые вычисляются при работе программы.

### 3.3.2 Скорости радиационных процессов

Скорости радиационных процессов удобно выразить через соответствующие сечения, приведённые к одному электрону [8; 40]. Для радиационного возбуждения  $\mu \rightarrow \nu$ , т.е. поглощения в спектральной линии с профилем  $\Phi_{\mu\nu}(\omega)$  (в предположении полного перераспределения по частотам), выполняется

$$\alpha_{\mu\nu}^{abs} = \nu_0 \int \frac{\sigma_{\mu\nu}^{bb} \Phi_{\mu\nu}(\omega) J_\omega}{\omega} d\omega, \quad (52)$$

где  $\nu_0$  – атомная частота,  $J_\omega$  – проинтегрированная по углам интенсивность излучения  $I_\omega$ , т.е.  $J_\omega = \int I_\omega d\Omega$ ,

$$\sigma_{\mu\nu}^{bb} = 2\pi^2 \alpha f_{\mu\nu}. \quad (53)$$

Если  $J_\omega$  выражена в ТВТ/(см<sup>2</sup>×эВ), её надо умножить на  $C_w = 4,23 \cdot 10^{-3}$ , чтобы преобразовать в атомные единицы.

Для радиационного девозбуждения, т.е. излучения с переходом  $\nu \rightarrow \mu$  с учётом индуцированного излучения по принципу детального равновесия имеем (см. [40]):



$$\alpha_{\nu\mu}^{em} = \nu_0 \frac{g_\nu}{g_\mu} \exp\left(\frac{\varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu}{\theta}\right) \int \frac{\sigma_{\mu\nu}^{bb} \Phi_{\mu\nu}(\omega)}{\omega} \left(\frac{\omega^3}{\pi^2 c^2} + J_\omega\right) e^{-\omega/\theta} d\omega. \quad (54)$$

Если ширина линии мала по сравнению с характерной длиной изменения полей излучения, то  $\Phi_{\mu\nu}(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$ ,  $\omega_0 = \varepsilon_\nu - \varepsilon_\mu$ , и, приближённо,

$$\alpha_{\mu\nu}^{abs} = 3,2 \cdot 10^{10} \omega_0^2 f_{\mu\nu} W(\omega_0), \quad (55)$$

$$\alpha_{\nu\mu}^{em} = 3,2 \cdot 10^{10} \omega_0^2 \frac{g_\nu}{g_\mu} f_{\mu\nu} [1 + W(\omega_0)], \quad (56)$$

где  $W(\omega)$  – спектральная плотность излучения:

$$W(\omega) = \frac{\pi^4}{60\sigma} \frac{J_\omega}{\omega^3} = 1,58 \cdot 10^7 \frac{J_\omega}{\omega^3}.$$

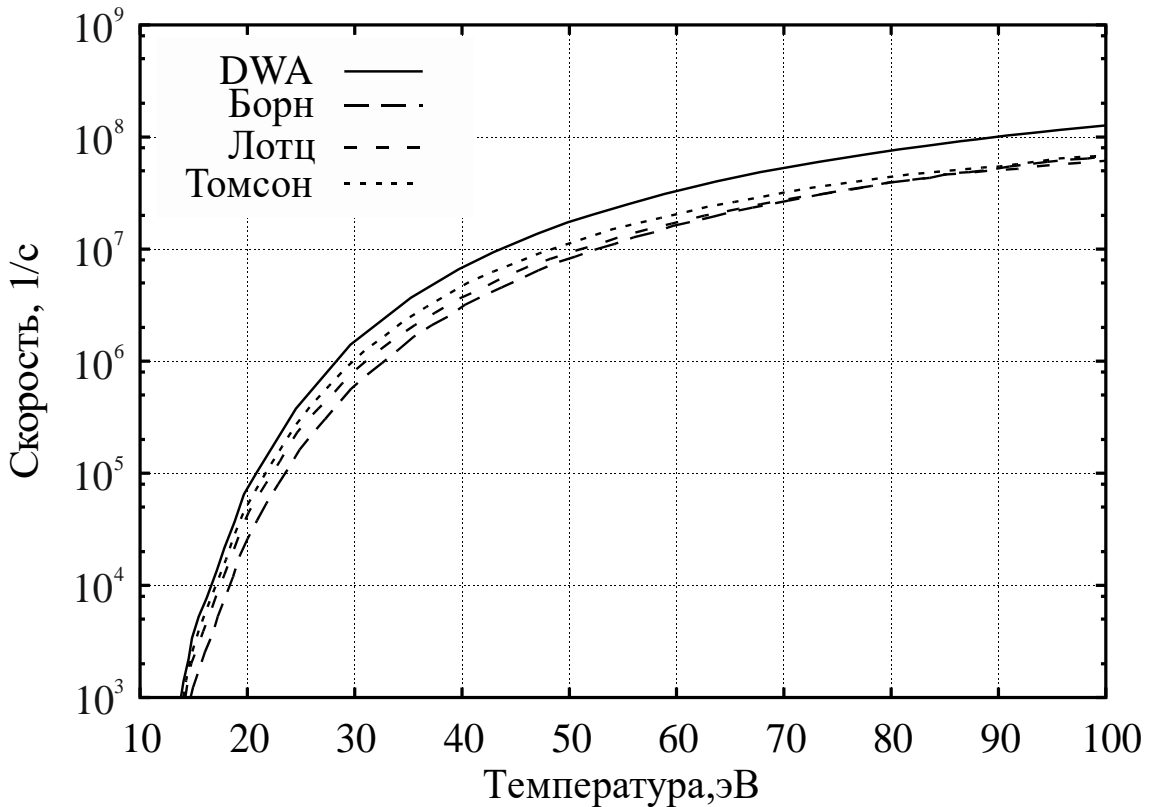


Рис. 17. Скорость ионизации электрона с уровня 4d иона  $\text{Sn}^{+9}$  в зависимости от температуры при плотности  $10^{-5}$  г/см<sup>3</sup>, вычисленная с использованием приближения искажённых волн (DWA), Борна, Томсона, и по формуле Лотца

Здесь  $\sigma = 1,028 \cdot 10^{-7}$  ТВт/(см<sup>2</sup>×В<sup>4</sup>) – постоянная Стефана-Больцмана.

Если система свободных электронов находится в равновесии при температуре  $\theta = kT$ , то можно записать аналогичные формулы для фотоионизации и фоторекомбинации в виде:

$$\alpha_{\mu}^{phi} = \nu_0 \int \frac{\sigma_{\mu}^{bf}(\omega) J_{\omega}}{\omega} d\omega, \quad (57)$$

$$\alpha_{\mu}^{phr} = \nu_0 g_{\mu} \exp\left(\frac{\zeta - \varepsilon_{\mu}}{\theta}\right) \int \frac{\sigma_{\mu}^{bf}(\omega)}{\omega} \left(\frac{\omega^3}{\pi^2 c^2} + J_{\omega}\right) e^{-\omega/\theta} d\omega, \quad (58)$$

где  $\zeta$  – химический потенциал,  $\varepsilon_{\mu}$  – порог ионизации.

В приближении Крамерса сечение фотоионизации с уровня  $\mu$  с эффективным зарядом  $Z_{\mu} = Z_{n\ell}$  имеет вид

$$\sigma_{\mu}^{bf}(\omega) = \frac{64\pi\alpha Z_{\mu} |\varepsilon_{\mu}|^{3/2}}{3\sqrt{6} g_{\mu}} \frac{1}{\omega^3}, \quad (59)$$

что даёт для скорости фотоионизации:

$$\alpha_{\mu}^{phi} = u_{\mu} \int_{|\varepsilon_{\mu}|}^{\infty} \frac{W(\omega)}{\omega} d\omega, \quad (60)$$

где

$$u_{\mu} = 4,45 \cdot 10^{10} Z_{\mu} \frac{|\varepsilon_{\mu}|^{3/2}}{g_{\mu}}.$$

Соответственно, скорость фоторекомбинации

$$\alpha_{\mu}^{phr} = 0,704 g_{\mu} \frac{n_e}{N_A} \frac{u_{\mu}}{\theta^{3/2}} e^{|\varepsilon_{\mu}|/\theta} \int_{|\varepsilon_{\mu}|}^{\infty} \frac{e^{-\omega/\theta}}{\omega} [1 + W(\omega)] d\omega. \quad (61)$$

В программе ФАС используются следующие формулы для сечений процессов фотоионизации и фоторекомбинации

$$\sigma_{\mu\nu}^{phi} = 2\pi\alpha a_0^2 \frac{1 + \alpha^2 \varepsilon}{1 + 0,5\alpha^2 \varepsilon} \frac{df}{dE} = \frac{2\pi\alpha}{g_{\mu}} a_0^2 \frac{1 + \alpha^2 \varepsilon}{1 + 0,5\alpha^2 \varepsilon} \frac{d(gf)}{dE}, \quad (62)$$

$$\sigma_{\nu\mu}^{phr} = \frac{\alpha^2 g_\mu}{2 g_\nu} \frac{\omega^2}{\varepsilon(1+0,5\alpha^2\varepsilon)} \sigma_{\mu\nu}^{phi}, \quad (63)$$

где  $\omega$  – энергия фотона и  $\varepsilon$  – энергия электрона. Для “силы осцилляторов” предлагается использовать интерполяционную формулу

$$\frac{d(gf)}{dE} = \frac{E_\omega}{E_e + p_3} p_0 x^{\frac{7-\ell-1}{2} p_1} y^{p_1}, \quad (64)$$

где  $x = \frac{E_e + p_3}{p_3}$ ,  $y = \frac{1 + p_2}{\sqrt{x + p_2}}$ ,  $p_0$ ,  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$  – параметры аппроксимации,  $\ell$  – орбитальный момент электрона ионизирующей оболочки,  $E_e$  – энергия электрона в эВ,  $E_\omega$  – энергия фотона в эВ,  $E_\mu$  – порог ионизации в эВ,  $E_e = E_\omega - E_\mu$ .

### 3.3.3 Автоионизация и диэлектронный захват

Вероятность автоионизации можно получить, совмещая процессы гашения и ионизации. Рассмотрим переход  $\gamma_0 \rightarrow \gamma$  с ионизацией электрона  $n^* \ell^*$  (который в непрерывном спектре будет иметь энергию  $\varepsilon$  и орбитальный момент  $\lambda$ ) с девозбуждением электрона  $n\ell \rightarrow n'\ell'$  ( $\varepsilon_{n'\ell'} < \varepsilon_{n\ell}$ ), тогда из (29) и (43) получаем

$$w_{\gamma_0\gamma}^{ai} = \sum_{\kappa} \left[ w'_{\kappa}(n\ell, n^* \ell^*; n'\ell') + w''_{\kappa}(n\ell, n^* \ell^*; n'\ell') \right], \quad (65)$$

$$w'_{\kappa}(n\ell, n^* \ell^*; n'\ell') = \frac{2\pi}{(2\ell^* + 1)} \sum_{\lambda} D_{n\ell, n^* \ell^*; n'\ell', \varepsilon\lambda}^{\kappa} \left( D_{n\ell, n^* \ell^*; n'\ell', \varepsilon\lambda}^{\kappa} - \sum_{\kappa'} E_{n'\ell', n^* \ell^*; n\ell, \varepsilon\lambda}^{\kappa'\kappa} \right),$$

$$w''_{\kappa}(n\ell, n^* \ell^*; n'\ell') = \frac{2\pi}{(2\ell^* + 1)} \sum_{\lambda} \left( \sum_{\kappa'} E_{n'\ell', n^* \ell^*; n\ell, \varepsilon\lambda}^{\kappa'\kappa} \right)^2.$$

Здесь  $\kappa = (2\varepsilon)^{1/2}$  – импульс налетающего электрона;  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon'$  и  $\lambda$ ,  $\lambda'$  – энергии и орбитальные моменты электрона до и после столкновения;  $D_{n\ell, n'\ell'; \varepsilon\lambda, \varepsilon'\lambda'}^{\kappa}$  и  $E_{\varepsilon\lambda, n'\ell', n\ell, \varepsilon'\lambda'}^{\kappa'\kappa}$  – прямые и обменные члены электронного взаимодействия, которые могут быть выражены через интегралы Слэтера и  $3jm$ -,  $6j$ -символы Вигнера.

Более простой подход основан на дипольном приближении [41]:

$$w_{nl,n^*\ell^*;n'\ell'}^{ai} = \frac{2\pi}{g_{n^*\ell^*}} \frac{f_{n'\ell',nl}}{\omega} \frac{g_{n'\ell'}}{g_{nl}} \left( \sum_{\tilde{\ell}} \frac{\ell^* + \tilde{\ell} + 1}{2} \int_0^{r_0} \frac{R_{n^*\ell^*}(r) R_{\tilde{\ell}(r)}}{r^2} dr \right)^2, \quad (66)$$

где  $\omega = \varepsilon_{nl} - \varepsilon_{n'\ell'}$ ,  $\varepsilon = \omega + \varepsilon_{n^*\ell^*} > 0$ ,  $R_{n\ell}(r)$  – волновые функции электронов. Величина в скобках может быть рассчитана в водородоподобном приближении, если воспользоваться связью матричных элементов ускорения и координаты.

Чтобы получить полную скорость автоионизации (в 1/с) с уровня  $n^*\ell^*$ , требуется просуммировать (65) или (66) по всем возможным состояниям  $\gamma_0, \gamma$ :

$$\alpha_{n^*\ell^*}^{ai} = 4,1 \cdot 10^{16} \sum_{n\ell, n'\ell'} N_{n\ell} \left( 1 - \frac{N_{n'\ell'}}{g_{n'\ell'}} \right) (1 - n_\varepsilon) w_{nl, n^*\ell^*; n'\ell'}^{ai}.$$

Скорость диэлектронного захвата на уровень  $n^*\ell^*$  может быть вычислена с использованием детального баланса:

$$\alpha_{n^*\ell^*}^{dc} = 1,17 \cdot 10^{-24} g_{n^*\ell^*} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon/\theta} \sum_{n'\ell', n\ell} N_{n'\ell'} \left( 1 - \frac{N_{n\ell}}{g_{n\ell}} \right) w_{nl, n^*\ell^*; n'\ell'}^{ai}. \quad (67)$$

Обозначим конфигурации, которые принимают участие в процессе:  $Q(k, s)$  – начальное состояние иона с возбуждённым (автоионизирующимся) электроном на оболочке  $n\ell$ ,  $Q''(k+1, s'')$  – конечное состояние иона после автоионизации. Кроме того, вводим обозначение для промежуточного состояния  $Q'(k, s')$  – состояние иона после тушения возбуждения (в присутствии возбуждённого электрона на оболочке  $n\ell$ ). Пусть  $\omega(Q, Q') = E_Q - E_{Q'}$  – энергия, выделенная при тушении возбуждения  $Q \rightarrow Q'$ ,  $\omega(Q'', Q) = E_{Q''} - E_Q$  – энергия, оставшаяся при автоионизации состояния  $Q'' \rightarrow Q$ .

$$\alpha_{n\ell}^{ai}(ks[ks'] \rightarrow k+1, s'') = 4,134 \cdot 10^{16} \times \frac{2\pi N_{n\ell}}{2(2\ell+1)} \frac{g_f(Q'Q)}{g_{Q'}} \frac{f^{phi}(n\ell, \omega(Q, Q'))}{\omega(Q, Q')},$$

$$f^{phi}(n\ell, \omega(Q, Q')) = 2,47 \cdot 10^{-7} \frac{\omega(Q, Q')^4}{Z_{n\ell}^2} f^H \left( n\ell, Z_{n\ell}, \frac{\omega(Q, Q')}{\theta} \right)$$

$$\alpha^{dc}(k+1, s'' \rightarrow ks[ks']) = C^{dc}(Q''[Q']Q)\alpha_{nl}^{ai}(ks[ks'] \rightarrow k+1, s'')$$

$$C^{dc}(Q''[Q']Q) = 0,704 \frac{N_e}{N_A} \frac{1}{\theta^{3/2}} \frac{g_{Q'}}{g_{Q''}} \exp\left(\frac{\omega(Q'', Q)}{\theta}\right).$$

Здесь  $f^H(n\ell, Z_{n\ell}, x)$  обозначено водородоподобное сечение фотоионизации уровня  $n\ell$  при энергии фотона  $x = \frac{\omega(Q, Q')}{\theta}$ .

Полная скорость автоионизации конфигурации  $Q(ks)$  определяется суммой по промежуточным состояниям  $Q'(ks')$

$$\alpha_{nl}^{ai}(ks \rightarrow k+1, s'') = \sum_{Q'(ks')} \alpha_{nl}^{ai}(ks[ks'] \rightarrow k+1, s'') \Big|_{d\varepsilon > 0}.$$

При вычислении скорости диэлектронной рекомбинации учитывается, что возбуждённое (автоионизационное) состояние может распадаться посредством излучения фотона без ионизации

$$\alpha^{dr}(k+1, s'' \rightarrow ks) = \sum_{Q'(ks')} \frac{\alpha^{em}(ks \rightarrow ks')\alpha^{dc}(k+1, s'' \rightarrow ks[ks'])}{\alpha^{em}(ks \rightarrow ks') + \alpha^{ai}(ks[ks'] \rightarrow k+1, s'')}.$$

В программе FAC проводится вычисление скорости автоионизации, как не зависящей от параметров плазмы. Скорость диэлектронного захвата зависит от температуры и плотности электронов и определяется по формуле, аналогичной (67).

### 3.4 Методика RUSAM

В случае тяжёлых элементов число ионных состояний с детальным описанием уровней, которые должны быть учтены в расчётах, может быть чрезвычайно большим. Именно поэтому необходимо использовать приближения, уменьшающие размер системы кинетических уравнений (см., например, такие подходы в [42; 43]). Рассмотрим радиационную атомную модель с неразрешённым спектром RUSAM, представленную в [44; 45].

Пусть для данного вещества и некоторой области температур и плотностей сетка по энергии фотонов выбрана таким образом, чтобы описать основные характеристики излучения (поглощения) для этого вещества. Предполагается, что отдельные сильные линии расположе-

ны внутри интервалов сетки и ширина таких линий значительно меньше, чем шаг сетки  $[E_i, E_{i+1}]$ ,  $i = 1, 2, \dots, n_E$ . Для упрощённого описания ионизационного состояния плазмы объединим энергетические уровни иона с кратностью  $k$  в группы  $s$  с близкими энергетическими уровнями (суперсостояния). Суперсостояние  $s$  может включать в себя часть уровней какой-то конфигурации, все уровни конфигурации или уровни нескольких конфигураций.

Пусть  $x_{ks}$  – концентрация такого суперсостояния,  $g_{ks}$  – соответствующий статистический вес ( $k = 1, 2, \dots, Z$ ,  $s = 0, 1, 2, \dots, s_{max}$ ). Среднюю энергию  $E_{ks}$  суперсостояния определим как

$$E_{ks} = \frac{1}{g_{ks}} \sum_{\gamma J \in ks} g_{ks\gamma J} E_{ks\gamma J},$$

где квантовые числа  $\gamma$  и угловой момент иона  $J$  определяют состояние иона с энергией  $E_{ks\gamma J}$ . Очевидно, что

$$g_{ks} = \sum_{\gamma J \in ks} g_{ks\gamma J}.$$

Для каждого иона в результате предварительной обработки детальной информации о спектральных линиях  $ks\gamma J \rightarrow k's'\gamma'J'$  проводится их проекция на выбранную сетку по энергии. Для суперлиний между двумя суперсостояниями  $s$  и  $s'$  иона кратности  $k$  полная сила осцилляторов  $gf_i(ks, ks')$  ( $gf$ -фактор) распределена на интервалах  $i = 1, 2, \dots$  энергетической сетки так, что

$$\overline{gf}_i(ks, ks') = \sum_{\gamma J \in ks, \gamma' J' \in ks'} gf(ks\gamma J, ks'\gamma'J'), \quad (68)$$

где суммирование выполняется только по переходам с энергией  $\omega$ , лежащей в интервале  $i$ :

$$\omega(ks\gamma J, ks'\gamma'J') = E_{k's'\gamma'J'} - E_{ks\gamma J} \in (E_i, E_{i+1}).$$

Средняя энергия для этого суперперехода имеет вид

$$\bar{\omega}_i(ks, ks') = \frac{\sum_{\gamma J \in ks, \gamma' J' \in ks'} \omega(ks\gamma J, ks'\gamma'J') gf(ks\gamma J, ks'\gamma'J')}{gf_i(ks, ks')}, \quad (69)$$

при расчёте которой включены только переходы в соответствующем интервале

$$\omega(ks\gamma J, ks'\gamma'J') \in (E_i, E_{i+1}).$$

Положение порогов ионизации определяется аналогично:

$$\bar{\varepsilon}_i(k+1, s'; k, s) = \frac{\sum_{\gamma J \in ks, \gamma' J' \in k+1, s'} \varepsilon(ks\gamma J, k+1, s'\gamma'J') g_{k+1, s'\gamma'J'}}{\sum_{\gamma J \in ks, \gamma' J' \in k+1, s'} g_{k+1, s'\gamma'J'}},$$

где

$$\varepsilon(ks\gamma J, k+1, s'\gamma'J') = E(k+1, s'\gamma'J') - E(ks\gamma J) \in (E_i, E_{i+1}).$$

Система уравнений поуровневой кинетики для концентраций суперсостояний  $x_{ks}$  имеет вид (25), но её содержание, конечно, другое.

В частности, скорость радиационного возбуждения (поглощения в линиях) определяется путём суммирования по интервалам энергии фотонов  $[E_i; E_{i+1}]$ :

$$\alpha_{ks, ks'}^{abs} = 3,2 \cdot 10^{10} \sum_{i=1}^{n_E} \frac{\overline{gf}_i(ks, ks')}{g_{ks}} \bar{\omega}_i^2(ks, ks') W\left(\frac{\bar{\omega}_i(ks, ks')}{\theta}\right), \quad (70)$$

где  $\bar{\omega}_i(ks, ks')$  – центр группы линий,  $\overline{gf}_i(ks, ks')$  – сила осцилляторов ( $gf$ -фактор), усреднённая по интервалу  $[E_i; E_{i+1}]$ .

Скорость излучения имеет вид

$$\alpha_{ks', ks}^{em} = 3,2 \cdot 10^{10} \sum_{i=1}^{n_E} \frac{\overline{gf}_i(ks, ks')}{g_{ks'}} \bar{\omega}_i^2(ks, ks') \left[1 + W\left(\frac{\bar{\omega}_i(ks, ks')}{\theta}\right)\right]. \quad (71)$$

Для решения линейной системы уравнений (25) используется метод Гаусса-Жордана с учётом блочной структуры матрицы (см. например, [46]).

С известными концентрациями ионов  $x_{ks}$  можно вычислить коэффициенты поглощения и эмиссионную способность плазмы, учитывая детальную информацию о спектре.

## 3.5 Частные случаи решения уравнения переноса излучения

### 3.5.1 Плоский слой

Прежде всего рассмотрим простейшую геометрию плазменного слоя и наиболее простой способ учёта неравновесности плазмы.

Для плоского слоя уравнение переноса излучения имеет вид

$$\mu \frac{dI_\omega}{dz} = j_\omega - \kappa_\omega I_\omega, \quad (72)$$

где  $\mu = \cos \vartheta$ ,  $I_\omega = I_\omega(z, \vartheta)$  – интенсивность излучения (см. рис. 18).

Если коэффициенты поглощения и излучательная способность не зависят от  $z$  и нет внешних источников излучения, то решение уравнения (72) может быть записано в виде

$$I_\omega = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\kappa_\omega z}{\mu}\right) \right], \quad \mu > 0. \quad (73)$$

Интегрируя (73) по углам, получим плотность потока излучения, выходящего в направлении оси  $z$ :

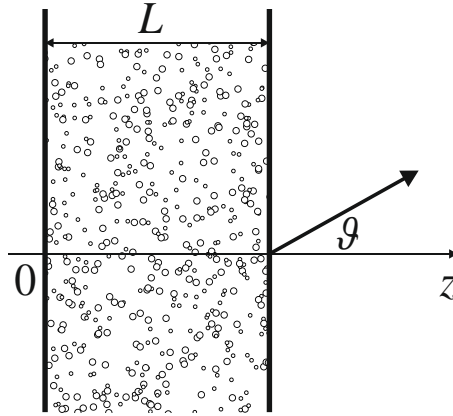
$$F_{\omega z} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} I_\omega \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} [1 - 2E_3(\kappa_\omega z)],$$

где  $E_k(x) = \int_x^\infty t^{-k} e^{-t} dt$  – интегральная экспонента.

Поток на границе слоя для плазмы с оптической толщиной  $\tau = \kappa_\omega L$

$$F_\omega|_{z=L} = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} (1 - 2E_3(\kappa_\omega z))|_{z=L} = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} [1 - e^{-\tau} + \tau e^{-\tau} - \tau^2 E_1(\tau)].$$



Рис. 18. Плоский слой плазмы толщины  $L$ 

### 3.5.2 Цилиндрический слой

Для аксиально-симметричного слоя плазмы уравнение переноса излучения имеет вид

$$\sin \vartheta \left( \cos \varphi \frac{\partial I_\omega}{\partial r} - \frac{\sin \varphi}{r} \frac{\partial I_\omega}{\partial \varphi} \right) + \kappa_\omega I_\omega = j_\omega, \quad (74)$$

где  $\vartheta$  – угол между осью цилиндра и направлением распространения излучения,  $\varphi$  – азимутальный угол (см. рис. 19).

Уравнение (74) при заданных  $\kappa_\omega$  и  $j_\omega$ , как правило, решается прямым методом путём интегрирования вдоль траекторий:

$$I_\omega(r, \vartheta, \varphi) = \int_0^\tau S_\omega(x') e^{\tau' - \tau} d\tau', \quad (75)$$

где  $\tau = \tau(x) = \int_0^x \kappa_\omega(\xi) d\xi / \sin \vartheta$  – оптическая толщина,  $\tau' = \tau(x')$ ,

$S_\omega(\vec{r}) = \frac{j_\omega(\vec{r})}{\kappa_\omega(\vec{r})}$  – функция источника. Координата  $x = x(r, \varphi)$  берётся

вдоль проекции луча на плоскость, перпендикулярную оси  $z$ . Она связана с радиусом  $r$  и углом направления проекции траектории луча  $\varphi$  на эту плоскость соотношением  $x = \sqrt{R^2 - r^2 \sin^2 \varphi} + r \cos \varphi$ , где  $R$  – радиус цилиндра. При решении уравнения (75) необходимо учитывать, что на границе  $r = R$  есть только исходящее излучение, т.е.  $I_\omega|_{r=R} = 0$  при  $\pi/2 < \varphi < 3\pi/2$ .

Основная трудность в расчётах заключается в вычислении концентраций ионных состояний путём решения системы уравнений (25)

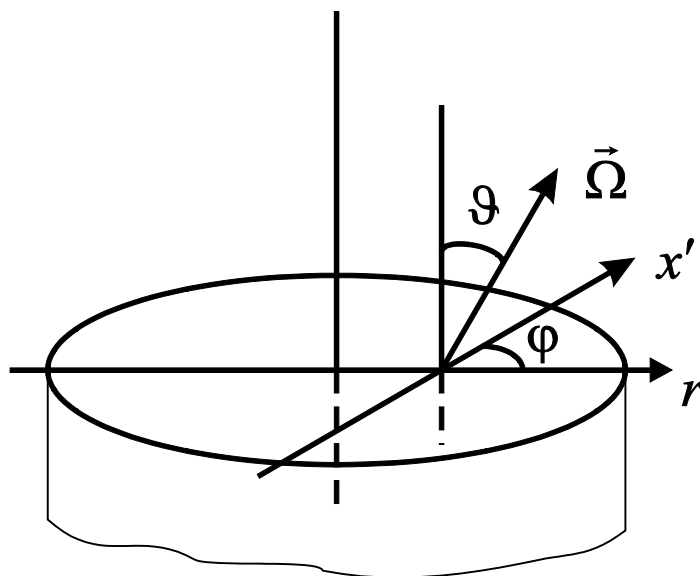


Рис. 19. Цилиндрический слой плазмы радиуса  $R$

и последующего вычисления коэффициентов поглощения и излучения в каждой из точек сетки по радиусу  $r = R$  с заданной температурой и плотностью электронов и с полем излучения  $U_{\omega}(r) = \iint I_{\omega} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ , полученным на предыдущей итерации.

### 3.5.3 Интерполяция

В практических расчётах такой подход является очень трудоёмким, поэтому, ввиду не слишком больших отличий ионизационного состояния прозрачной и непрозрачной плазмы в области её умеренных плотностей, можно для вычисления свойств неравновесной плазмы в газодинамических расчётах (в частности, коэффициентов поглощения и эмиссионной способности) приготовить таблицы для двух предельных случаев, а именно, для прозрачных и оптически толстых слоёв плазмы, и использовать интерполяцию между этими таблицами для промежуточных оптических толщин [47].

При наличии таблиц для двух предельных случаев в газодинамических расчётах можно получать коэффициенты поглощения фотонов и эмиссионную способность плазмы посредством интерполяции таблиц с помощью обобщённого ескаре-фактора – отношения выходящего излучения и излучения, произведённого внутри слоя:

$$\xi = \frac{\int F_{rad} dS}{4\pi \int \int j_{\omega} d\omega dV},$$

где  $F_{rad}$  – поток излучения,  $S$  – площадь поверхности слоя, а интеграл в знаменателе берётся по объёму и энергии фотонов.

При решении уравнения переноса излучения будем использовать непрозрачности и излучательную способность в виде [48–50]:

$$j_{\omega} = \xi j_{\omega}^0 + (1 - \xi) j_{\omega}^1, \quad (76)$$

$$k_{\omega} = \xi k_{\omega}^0 + (1 - \xi) k_{\omega}^1. \quad (77)$$

Здесь верхний индекс “0” соответствует прозрачному случаю, а “1” – оптически толстому. Так как параметр  $\xi$  зависит от решения уравнения переноса излучения, то требуется несколько итераций (порядка трёх), чтобы получить  $\xi$ , согласованный с фактическим полем излучения.

Метод интерполяции даёт приемлемые результаты в широком диапазоне плотностей электронов. Метод очень эффективен, но требует значительных предварительных усилий, связанных с подготовкой таблиц для прозрачной и оптически плотной плазмы. Интерполяционные формулы (76) и (77) также могут быть использованы для других величин, таких как средний заряд иона, заселённость уровней и т.п.

## 3.6 Результаты расчётов

### 3.6.1 Плазма неона

Неравновесные модели плазмы активно используются в газодинамическом моделировании плазмы для проведения численных экспериментов. Проверка используемых моделей с помощью эксперимента является затруднительной: так как в неравновесных условиях тяжело не только определить температуру и плотность, но и создать плазму, имеющую однородное распределение параметров во времени и пространстве. Единственным способом проверки кодов является проведение вычислительного эксперимента и сравнение результатов, полученных с помощью разных кодов, между собой. Такую возможность предоставляет участие в семинарах NLTE. Всем участникам конференции предлагается провести расчёты плазменных характеристик хотя бы для одного тестового случая из заранее выбранных организаторами. Во время работы конференции проводится сравнение различных плазменных характеристик при заданных начальных условиях.

На конференции NLTE7 [13] предлагалось провести расчёты плазмы неона. На рис. 20 приведено сравнение средней степени ионизации в плазме неона при разных плотностях. Выбраны изотермы, со-

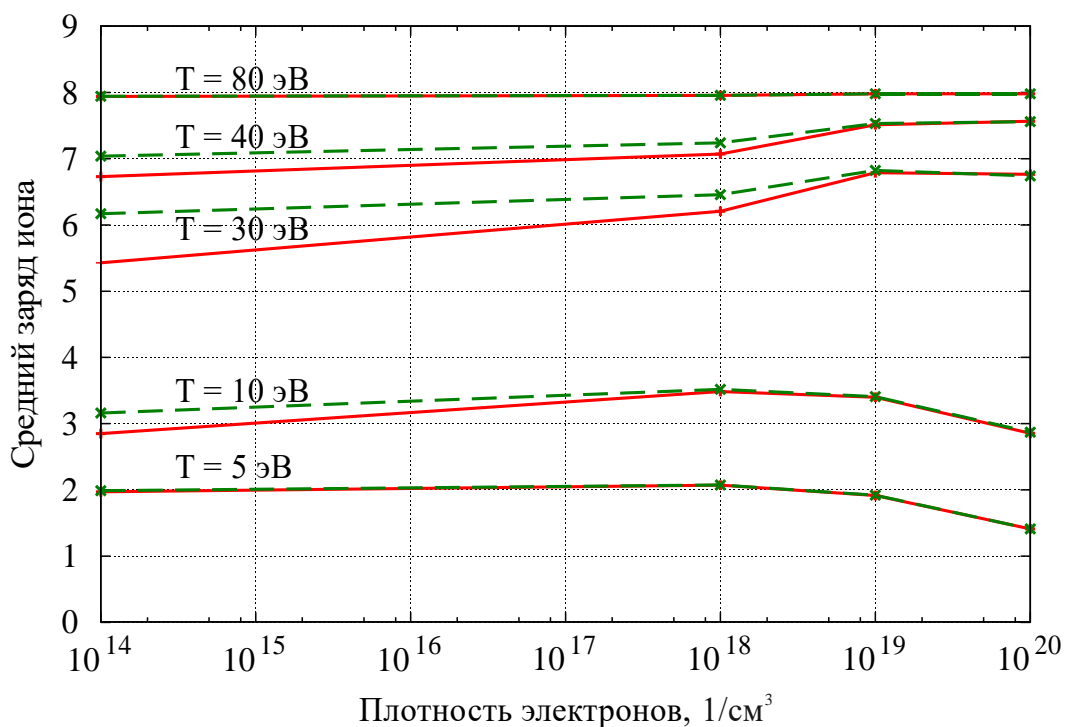


Рис. 20. Средняя степень ионизации в прозрачной плазме неона. Красные кривые – вычисления, проведённые с учётом диэлектронной рекомбинации. Зелёные кривые – результаты расчётов без учёта диэлектронной рекомбинации

ответствующие 5, 10, 30, 40 и 80 эВ. По рисунку видно, что при температурах 5 и 80 эВ влияние учёта диэлектронной рекомбинации мало. Основное влияние она оказывает при температуре плазмы 30 эВ. Также можно видеть, что при возрастании плотности электронов роль диэлектронной рекомбинации уменьшается. При плотности электронов  $N_e = 10^{19} \text{ 1/см}^3$  влияние становится незаметным.

На рис. 21 приведено сравнение средней степени ионизации в плазме неона при плотности электронов  $N_e = 10^{18} \text{ 1/см}^3$  по различным программам. Для проведения сравнения были выбраны наиболее известные коды ATOMIC (LANL, USA), FLYCHK (IAEA, Austria), SCSF (Sandia Nat Lab, USA), различающиеся методами построения системы кинетических уравнений и подходом к вычислению скоростей процессов в плазме. Из рисунка видно, что средняя степень ионизации плазмы, полученная по программе THERMOS, верно передаёт зависимость от температуры.

Для объяснения отличий рассмотрим подробнее скорости процессов при плотности электронов  $N_e = 10^{18} \text{ 1/см}^3$  и температуре  $T = 30$  эВ. Анализ этой точки проводился на конференции NLTE7, где исследовалось влияние максимального числа учитываемых оболочек  $n_{\text{max}}$  на ионизацию плазмы неона. В таблице 14 приведено сравнение

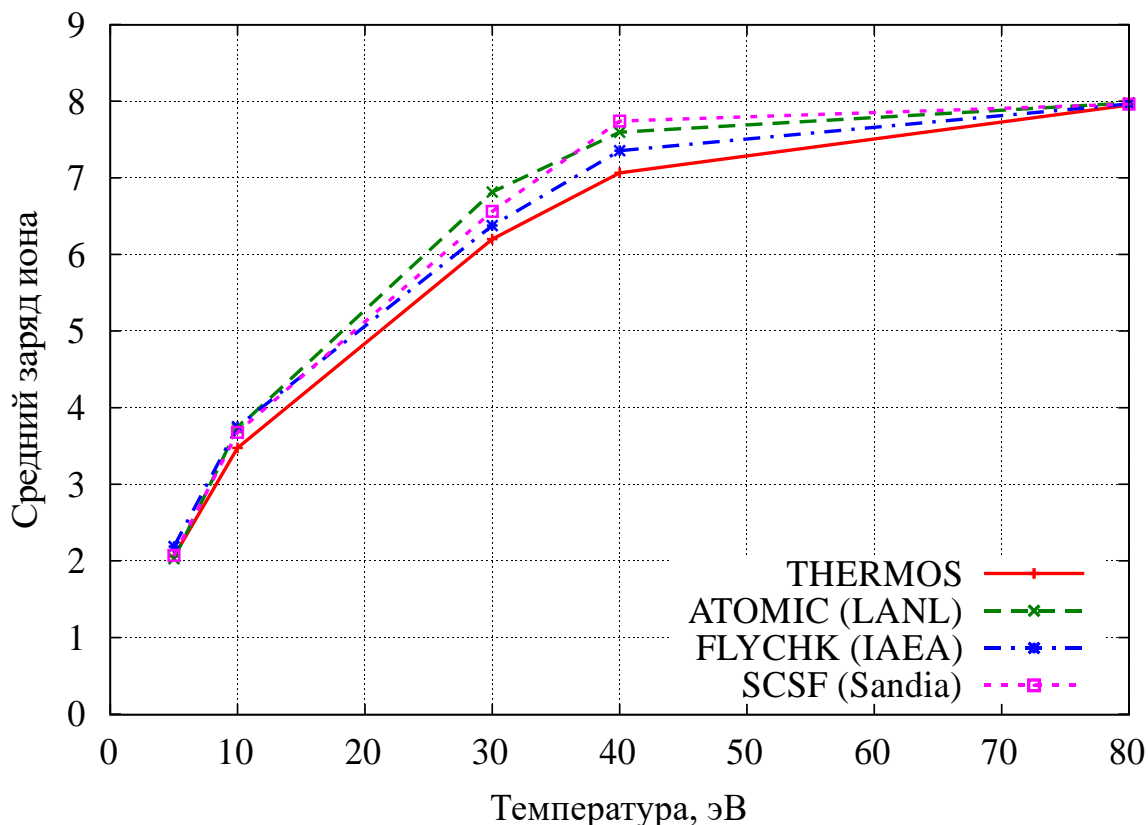


Рис. 21. Средняя степень ионизации в прозрачной плазме неона при плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup> по различным программам

средних степеней ионизации в плазме неона, полученных по разным программам. Отдельной строкой приведено значение  $Z_0$  для передаваемой вместе с данным отчетом версии базы данных неона с  $n_{\max} = 6$ . Из таблицы можно видеть, что учёт дополнительного числа оболочек может сильно изменить среднюю степень ионизации плазмы.

Таблица 14: Средняя степень ионизации  $Z_0$  плазмы неона при плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup> и температуре  $T = 30$  эВ при разных значениях  $n_{\max}$

$n_{\max}$	THERMOS	ATOMIC	FLYCHK	SCSF
4	6,11	6,42	6,04	6,22
8	6,38	6,81	6,38	6,56
$\infty$	–	6,84	6,49	6,64
6	6,20	–	–	–

На рис. 22 приведено распределение вероятностей  $P_k$  по кратностям ионизации  $k$  в прозрачной плазме неона, вычисленное по разным программам с максимальным числом учитываемых оболочек  $n_{\max} = 8$ . Распределение по степеням ионизации соответствует резуль-

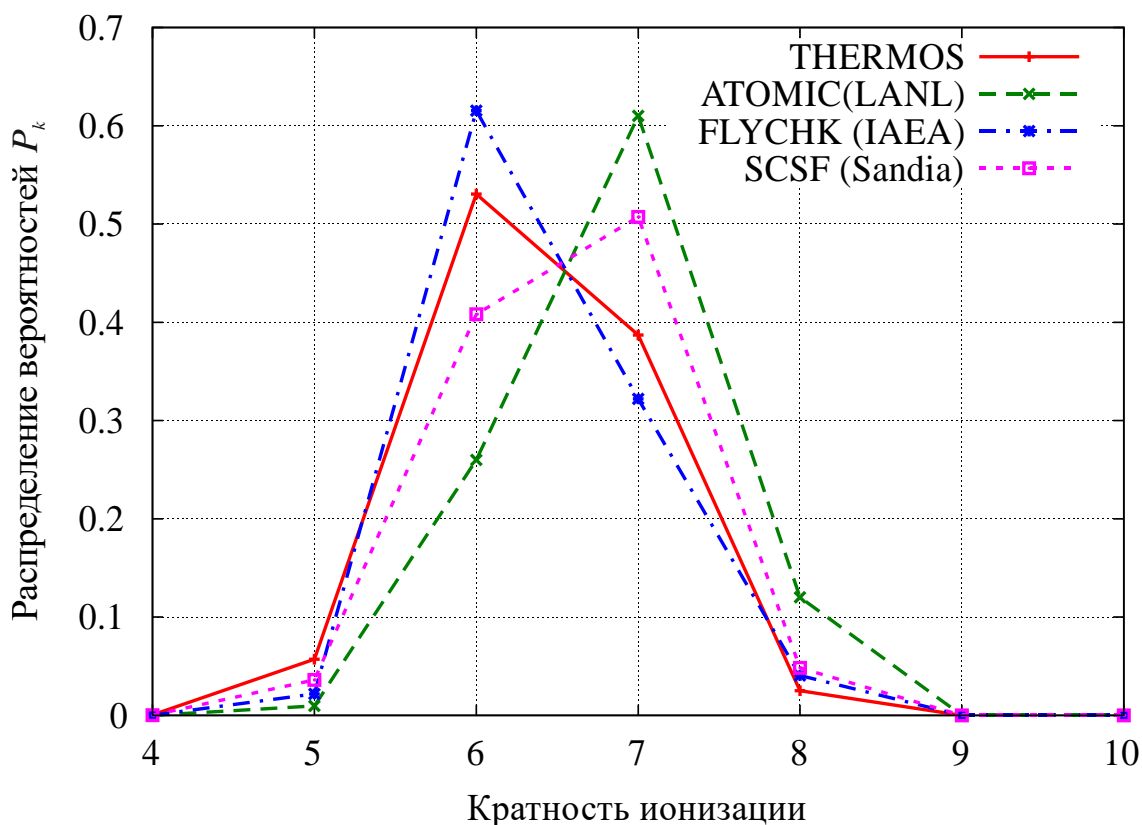


Рис. 22. Распределение вероятностей  $P_k$  по кратностям ионизации  $k$  в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup>. Максимальное число учитываемых оболочек  $n_{\max} = 8$

татам таблицы 14. Программы THERMOS и FLYCHK (IAEA, Austria) имеют одинаковую среднюю степень ионизации при этих условиях и, соответственно, близкое распределение, в то время как программы ATOMIC (LANL, USA) и SCSF (Sandia Nat Lab, USA) дают максимальную вероятность для иона  $\text{Ne}^{+7}$ .

Рассмотрим вклад различных процессов в суммарные скорости ионизации и рекомбинации при этих условиях в плазме. На рисунках 23 – 26 приведены скорости процессов для ионов с разной кратностью  $k$  в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup>. Из верхнего рис. 23 можно видеть, что основной вклад в ионизацию состояний с  $k \leq 6$  даёт процесс автоионизации, для  $k > 6$  вклад автоионизации падает на порядки и ведущим становится процесс столкновительной ионизации. Это объясняется тем, что число автоионизационных состояний для  $k > 6$  мало. Аналогичную картину, но с границей по  $k = 7$  можно видеть и на нижнем рисунке для скоростей рекомбинации. Вклад фоторекомбинации при этих условиях в плазме не существен.

На рис. 24 приведено сравнение скоростей ионизации (верхний) и рекомбинации (нижний), полученных по разным программам. Следует отметить, что в программе ATOMIC используется максимальное число конфигураций и скорости процессов вычисляются по волновым функциям для каждого случая. Коды FLYCHK и SCSF используют программу FAC для вычисления сечений и скоростей. FLYCHK использует детальный подход на ограниченном числе конфигураций, в то время как SCSF использует некоторые методики усреднения для включения максимального числа возбуждённых конфигураций. Из верхнего графика видно, что суммарная скорость ионизации фактически совпадает у программ THERMOS, FLYCHK и SCSF. Код ATOMIC даёт более высокую скорость ионизации. Аналогичная картина наблюдается и на нижнем рисунке для суммарной скорости рекомбинации. Из рисунка также видно, что программа THERMOS даёт скорость рекомбинации выше, чем коды FLYCHK и SCSF, что, вероятно, связано с количеством учитываемых ионов.

На рис. 25 приведено сравнение скоростей столкновительной ионизации (верхний) и автоионизации (нижний), полученных по разным программам. Можно видеть, что скорости, вычисленные по разным программам, фактически не отличаются. На рис. 26 приведено сравнение скоростей трёхчастичной рекомбинации (верхний), диэлектронного захвата (средний) и фоторекомбинации (нижний), полученных по разным программам. Скорости диэлектронного захвата и фоторекомбинации отличаются незначительно. Основные отличия – в скоростях столкновительной рекомбинации, что можно объяснить отличиями в числе учитываемых конфигураций (FLYCHK, SCSF, THERMOS). Отличие кода ATOMIC связано с более точным учётом уровней ионов и сечений.

На рисунках 27 – 28 приведены зависимости скоростей ионизации и рекомбинации от числа учитываемых дискретных оболочек. Как можно увидеть, основная зависимость от числа оболочек при этих условиях в плазме связана с столкновительными процессами. Учёт большего числа оболочек слабо влияет на процессы автоионизации и диэлектронного захвата, что можно объяснить тем, что основной вклад в эти процессы дают автоионизационные состояния с наличием дополнительного возбуждённого электрона на уровне  $n = 2$ . В то же время становится понятно, что недостаточный учёт уровней в некоторых случаях способен привести к сдвигу ионизационного состояния плазмы.

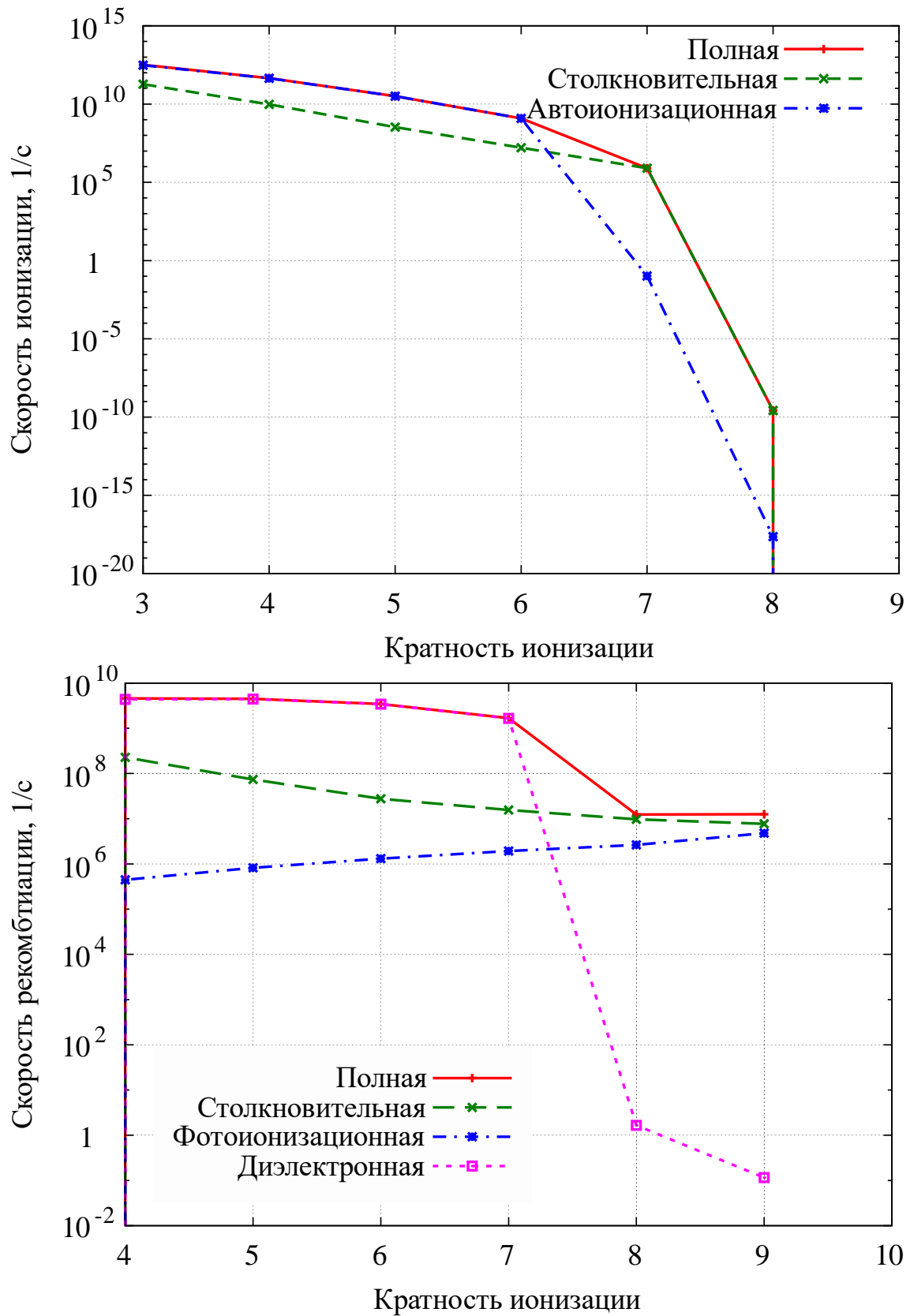


Рис. 23. Вклад различных процессов в суммарные скорости ионизации (верхний график) и рекомбинации (нижний график) в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup>. Максимальное число учитываемых оболочек  $n_{\max} = 8$



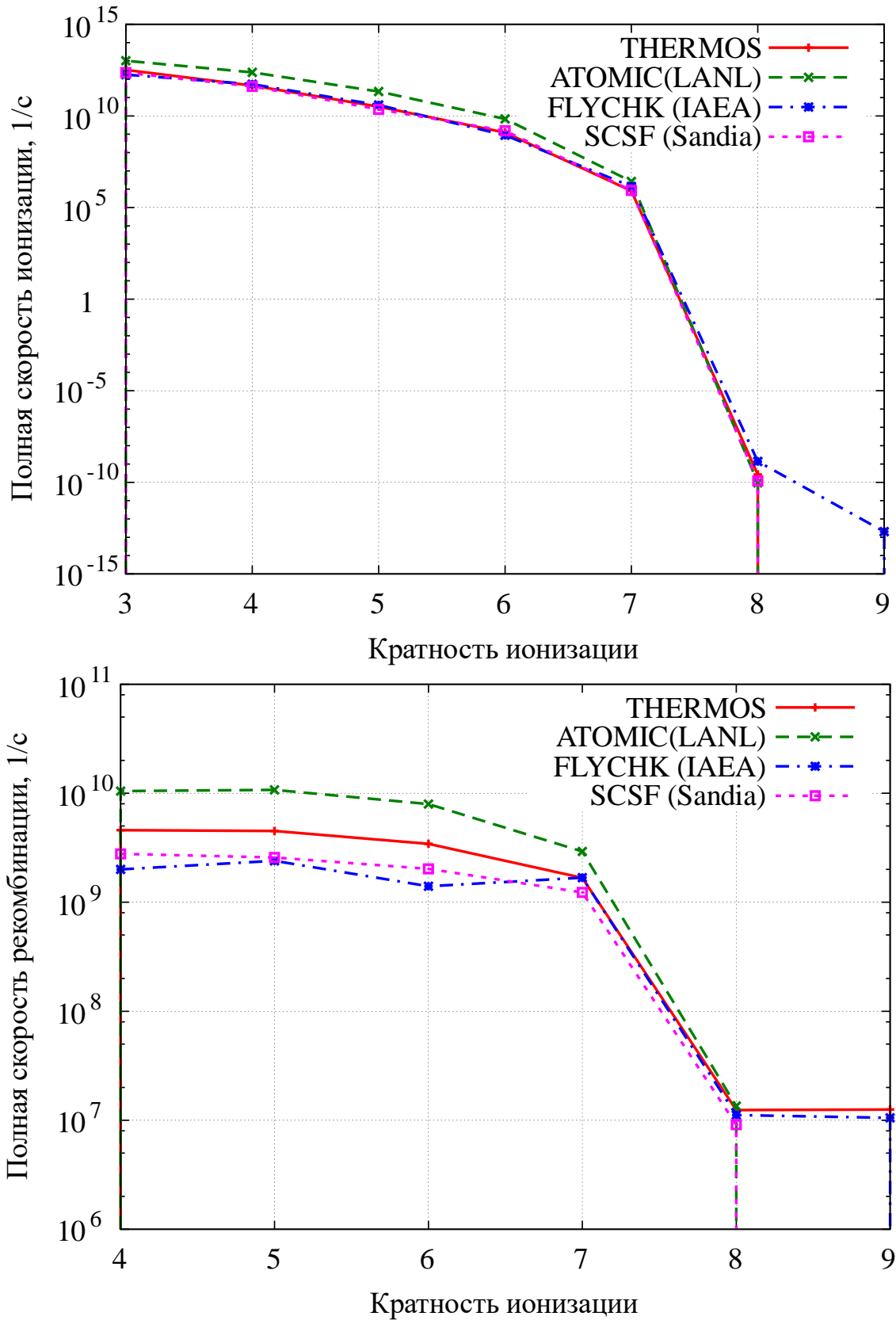


Рис. 24. Суммарные скорости ионизации (верхний график) и рекомбинации (нижний график) в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup> по разным программам. Максимальное число учитываемых оболочек  $n_{\max} = 8$

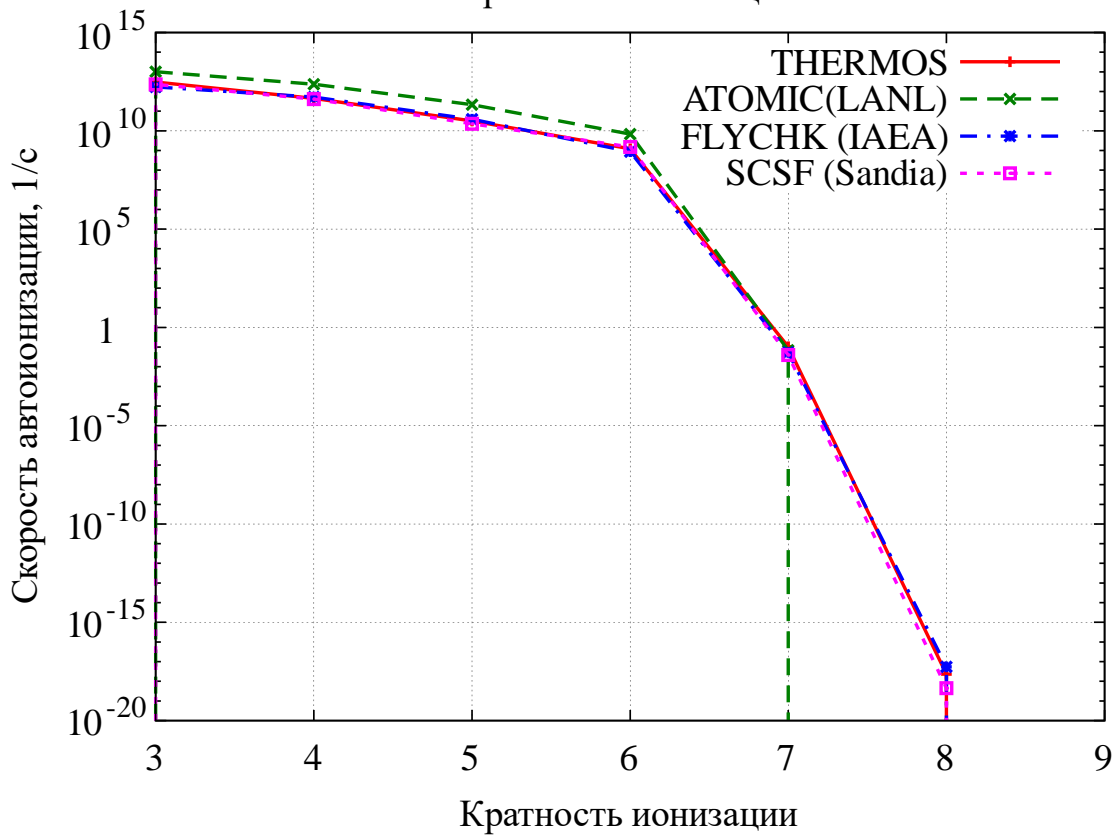
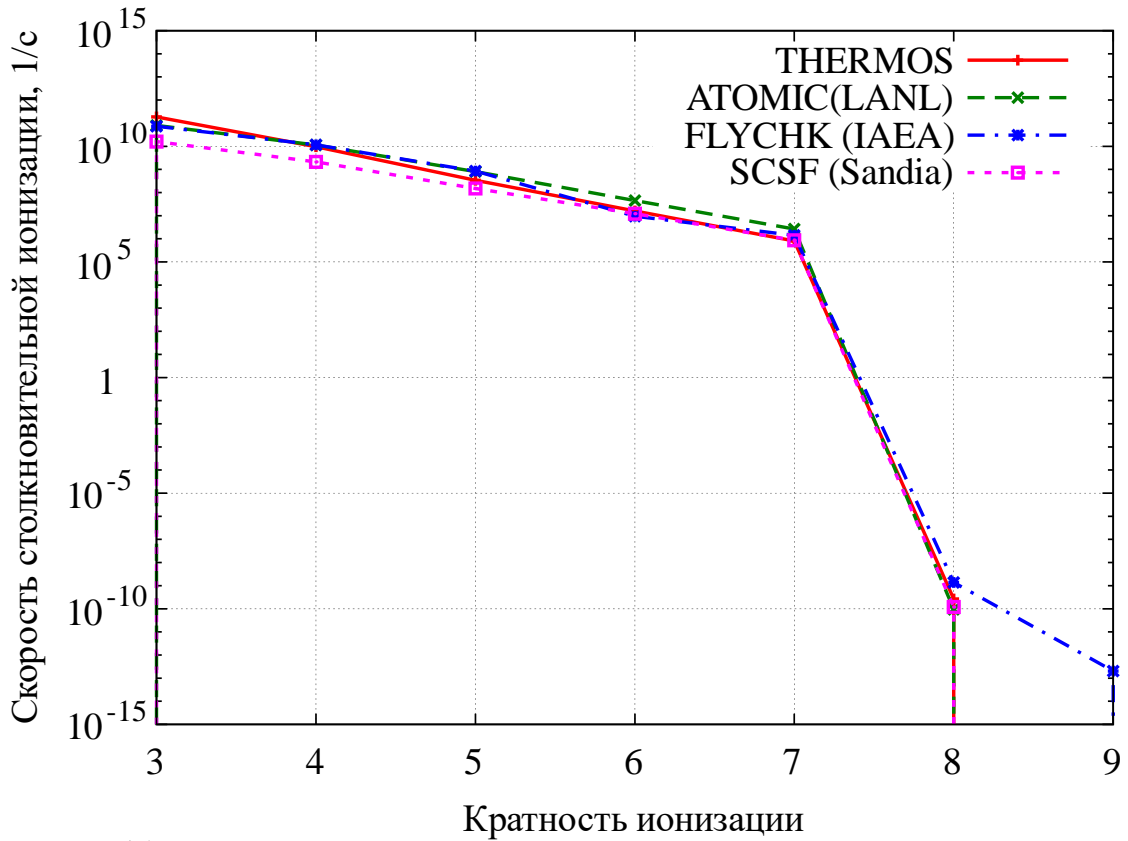


Рис. 25. Скорости столкновительной (верхний график) и автоионизации (нижний график) в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup> по разным программам. Максимальное число учитываемых оболочек  $n_{\max} = 8$

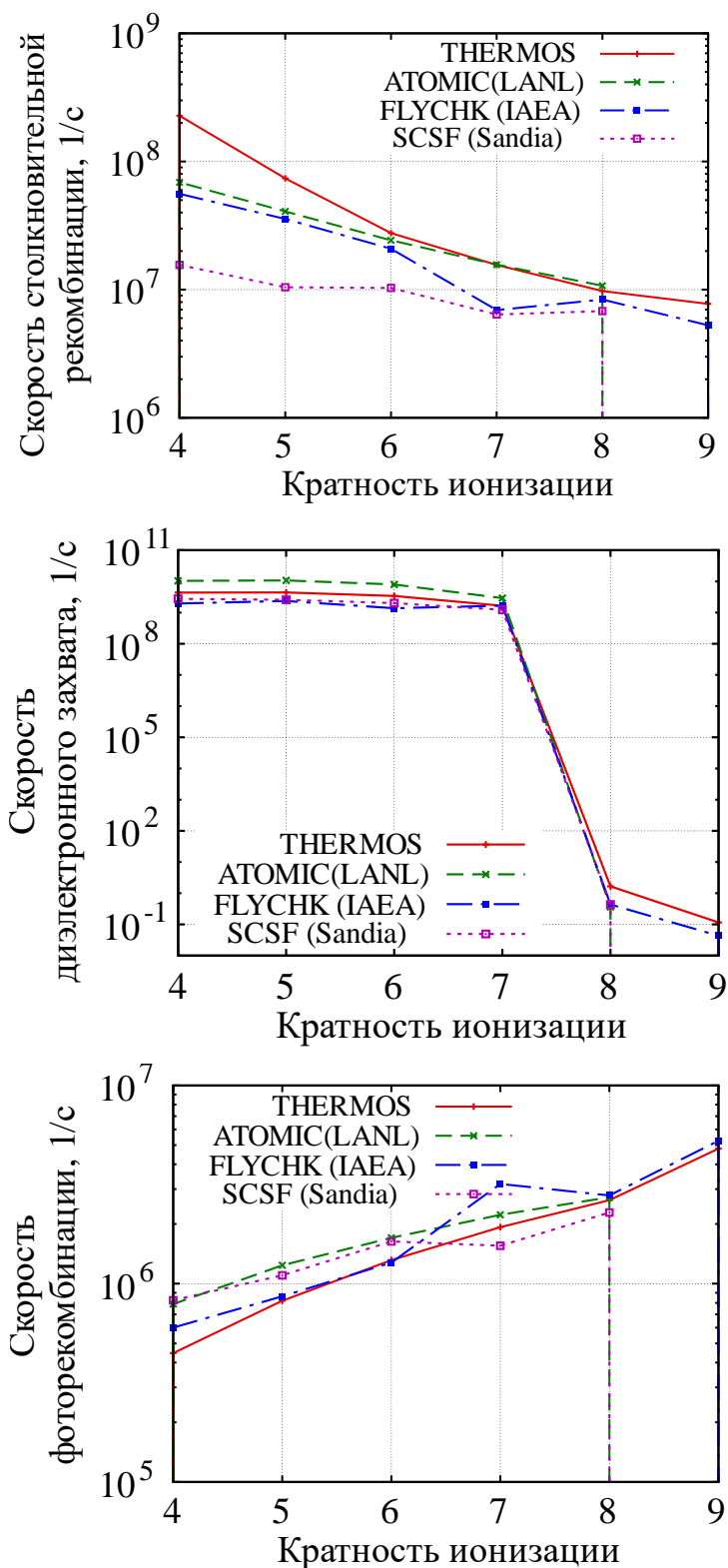


Рис. 26. Скорости столкновительной (верхний график), диэлектронной (средний график) и фоторекомбинации (нижний график) в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup> по разным программам.

Максимальное число учитываемых оболочек  $n_{\max} = 8$

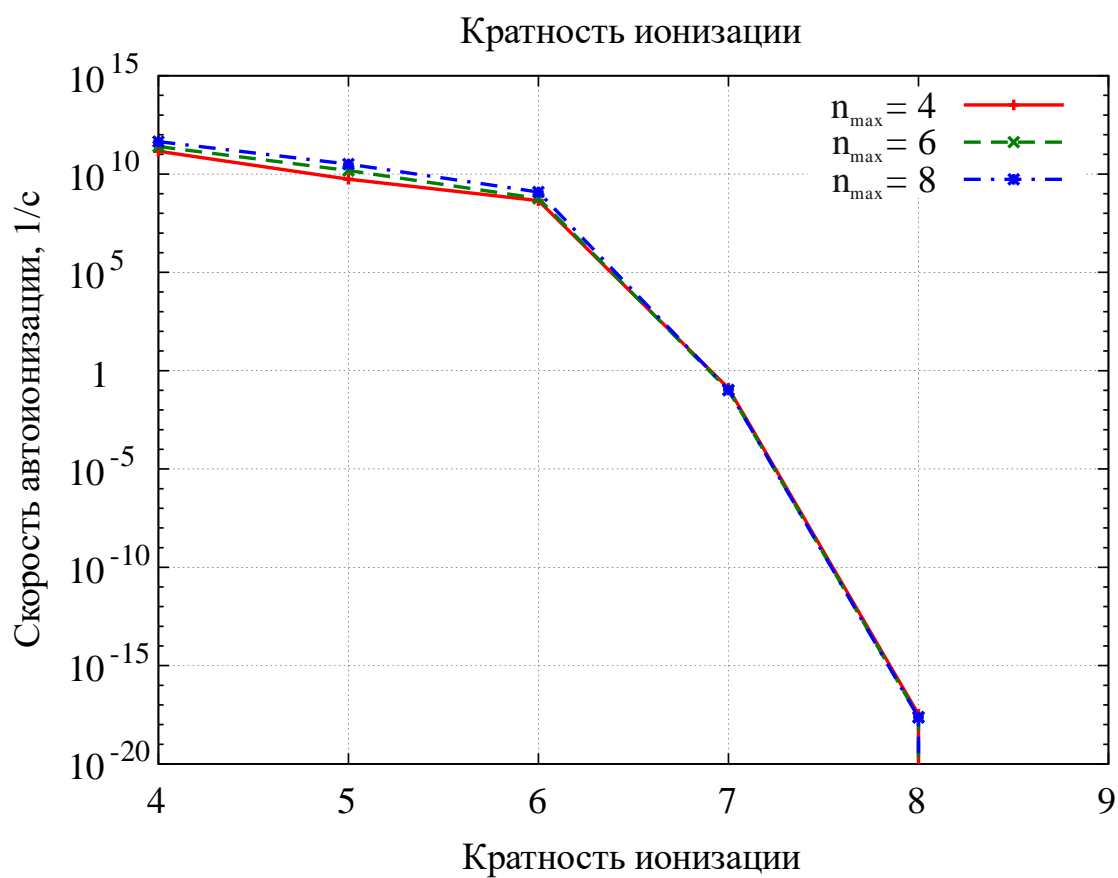
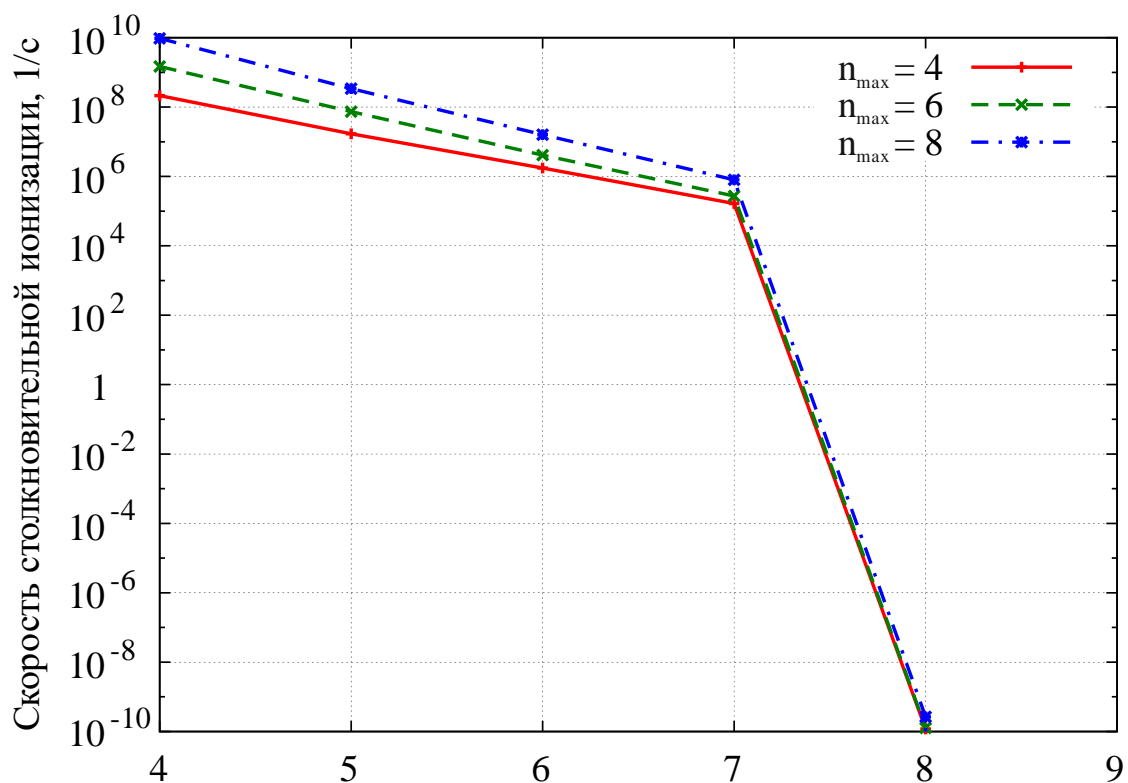


Рис. 27. Влияние учитываемого числа оболочек на скорость столкновительной (верхний график) и автоионизации (нижний график) в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup>

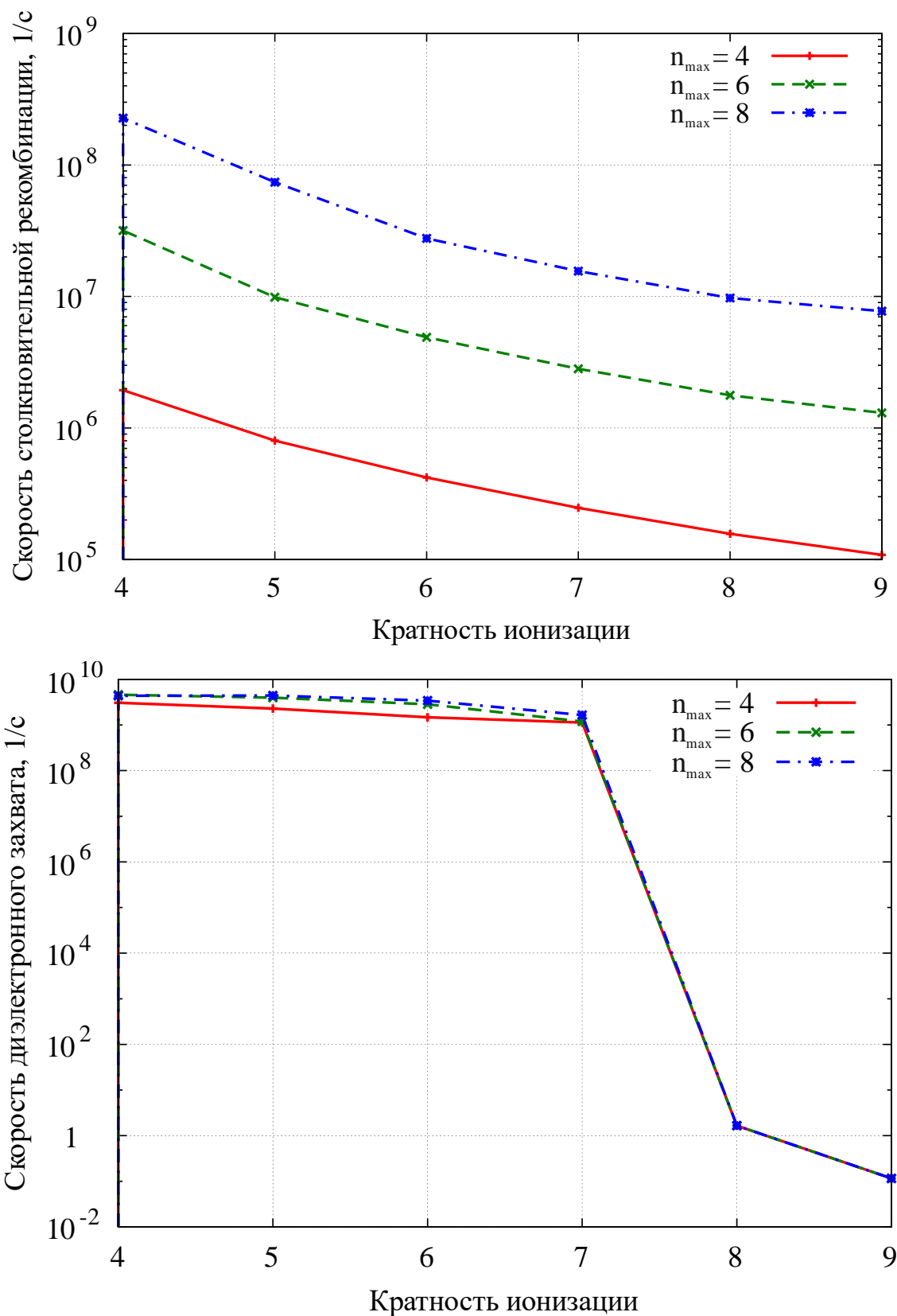


Рис. 28. Влияние учитываемого числа оболочек на скорость трёхчастичной рекомбинации (верхний график) и диэлектронного захвата (нижний график) в прозрачной плазме неона при температуре  $T = 30$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$  1/см<sup>3</sup>

### 3.6.2 Плазма олова

В рамках разработки источника коротковолнового излучения (Extreme Ultraviolet, или EUV) на длине волны 13,5 нм для задач литографии [18] большое внимание уделяется точным расчётам спектральных характеристик плазмы веществ, излучающих в данном диапазоне: литий, ксенон, олово. Расчёты плазменных источников излучения требуют высокой точности атомных данных, так как полезный диапазон источника составляет всего 2% по длинам волн вблизи 13,5 нм.

Для олова с помощью кодов THERMOS, FAC и RGB были получены данные для банка данных, позволяющие получать радиационные свойства плазмы олова в широком диапазоне температур и плотностей. Влияние различных подходов к расчётам кинетики проанализировано на рисунках 29 – 30. На рис. 29 показано влияние диэлектронной рекомбинации при той же температуре  $T = 15,85$  эВ. Можно видеть, что различие между двумя подходами (с учётом и без учёта диэлектронной рекомбинации) уменьшается с 30% при плотностях электронов меньше  $10^{16}$  1/см<sup>3</sup> до нуля при плотностях выше  $10^{20}$  1/см<sup>3</sup>.

На рис. 30 приведена зависимость от оптической толщины плазмы. Расчёты были сделаны для плоских слоёв плазмы олова с толщиной  $L = 0$  и  $L = 300$  мкм. Как видно из рисунка, средний заряд иона внутри 300-микронного слоя при электронной плотности  $10^{19}$  1/см<sup>3</sup> на 15% больше, чем в оптически тонком слое.

На рисунках 31 – 32 приведена зависимость среднего заряда иона для плазмы олова при различных температурах в широком диапазоне электронных плотностей. Здесь рис. 31 соответствует оптически прозрачной плазме, в то время как на рис. 32 приведён средний заряд иона в центре плоского слоя олова толщиной 300 мкм.

Из рисунков видно, что при изменении плотности электронов в интервале  $10^{18} - 10^{20}$  1/см<sup>3</sup> (величина зависит от температуры)  $Z_0$  меняется от коронального значения до полностью равновесного. Различие между оптически тонким и оптически толстым случаями достигает 30%. Населённости излучающих уровней оптически плотной плазмы могут быть в несколько раз больше, чем в оптически тонкой. Конечно, увеличение излучательной способности будет компенсировано непрозрачностью. Таким образом, в общем случае ионизационное состояние плазмы определяется путём решения уравнения переноса излучения совместно с поуровневой кинетикой.

На рис. 33 приведён спектр излучения цилиндрического столба плазмы олова с радиусом  $R = 100$  мкм при температуре  $T = 32$  эВ и плотности электронов  $n_e = 10^{19}$  1/см<sup>3</sup>, полученный путём детального

самосогласованного расчёта с учётом 20000 групп фотонов (красная кривая) и путём расчёта на 100 группах методом RUSAM (зелёная кривая).

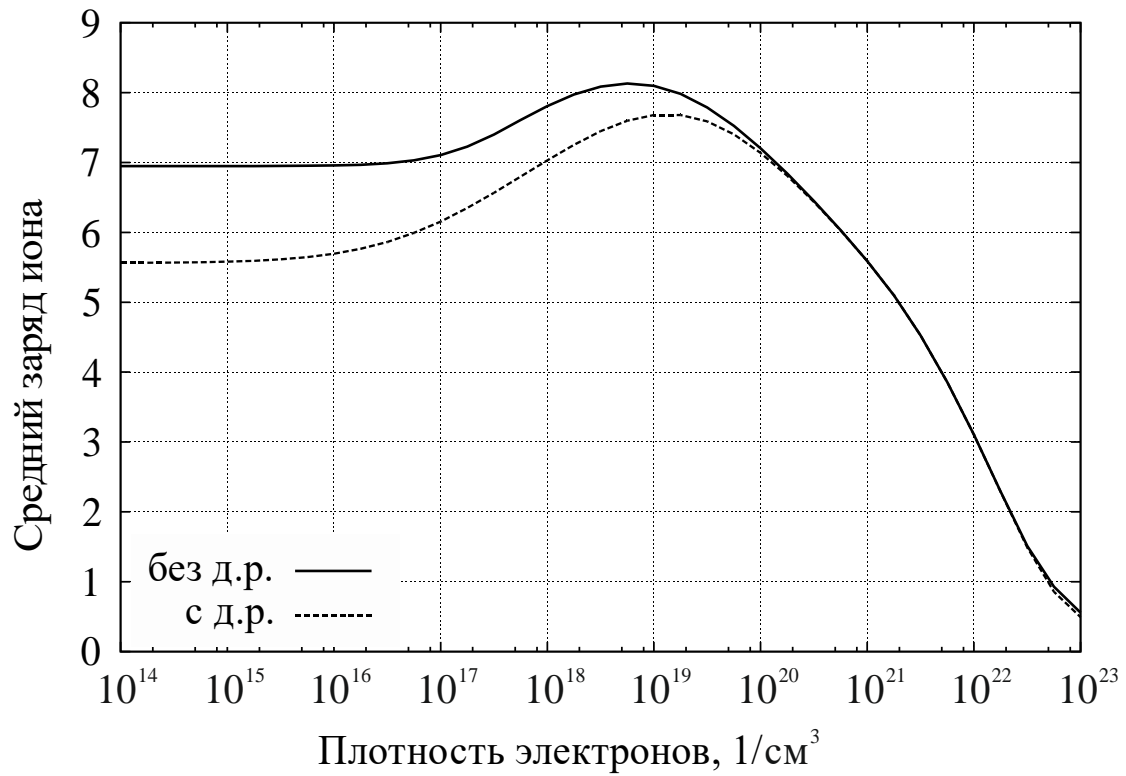


Рис. 29. Влияние диэлектронной рекомбинации на средний заряд иона в плазме олова при температуре  $T = 15,85$  эВ

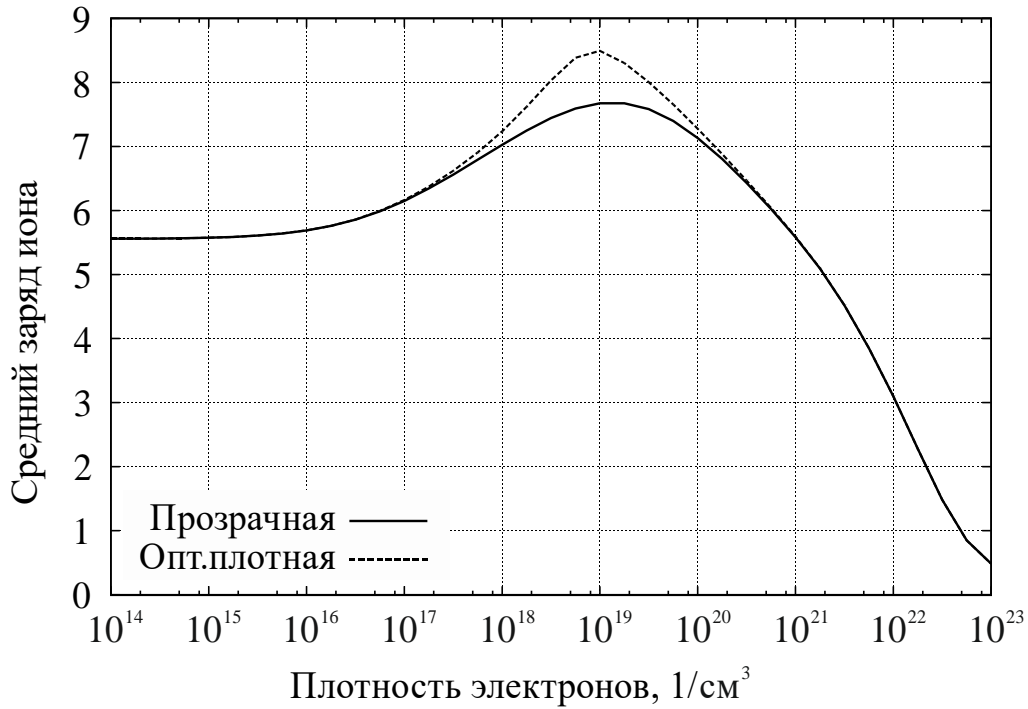


Рис. 30. Сравнение среднего заряда олова  $Z_0$  при температуре  $T = 15,85$  эВ для оптически прозрачной (сплошная линия) и оптически плотной (штриховая линия) плазмы для слоя толщиной  $L = 300$  мкм

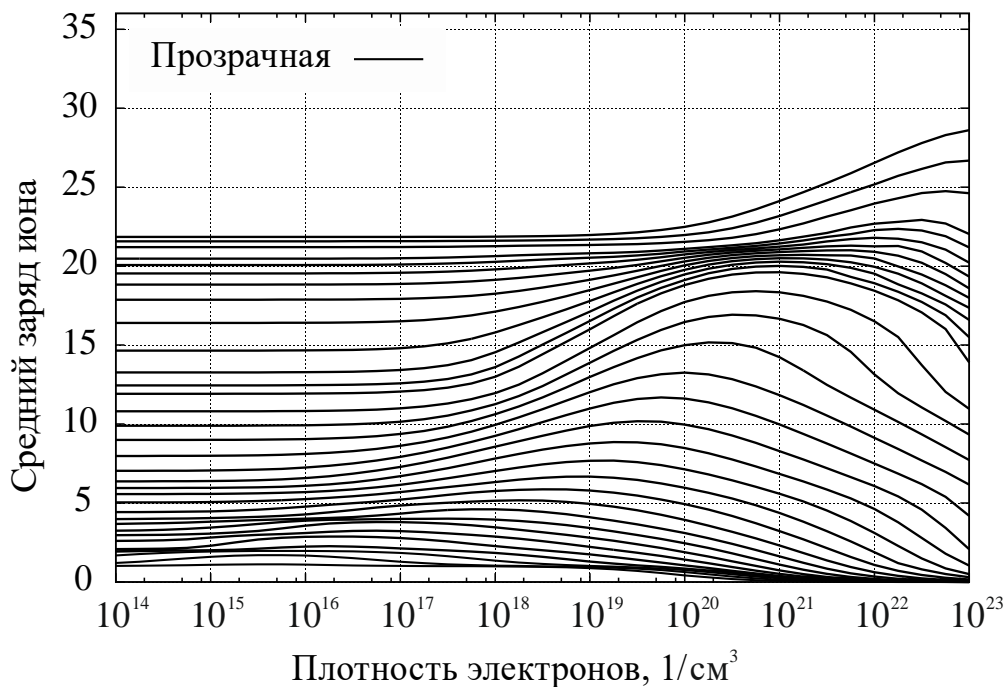


Рис. 31. Изотермы среднего заряда иона плазмы олова (оптически тонкий случай). Шаг сетки для кривых при различных температурах от  $T = 1$  эВ (нижняя изотерма) до  $T = 398$  эВ (верхняя изотерма) равен  $\Delta \lg T = 0,1$



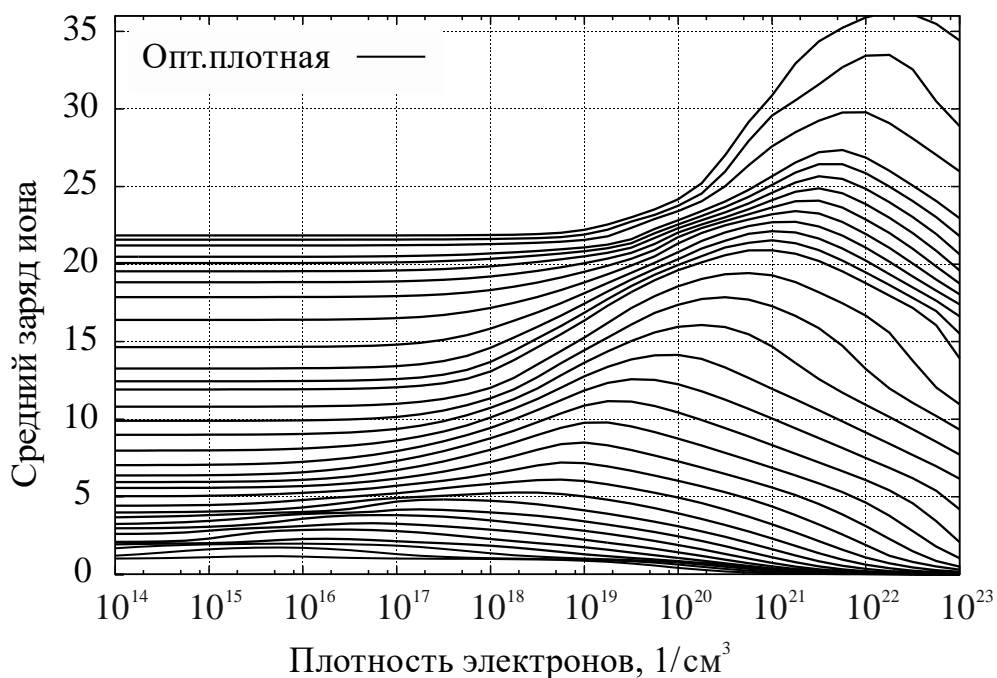


Рис. 32. Изотермы среднего заряда иона плазмы олова для оптически плотной плазмы (толщина слоя  $L = 300$  мкм). Шаг сетки для кривых при различных температурах от  $T = 1$  эВ (нижняя изотерма) до  $T = 398$  эВ (верхняя изотерма) равен  $\Delta \lg T = 0,1$

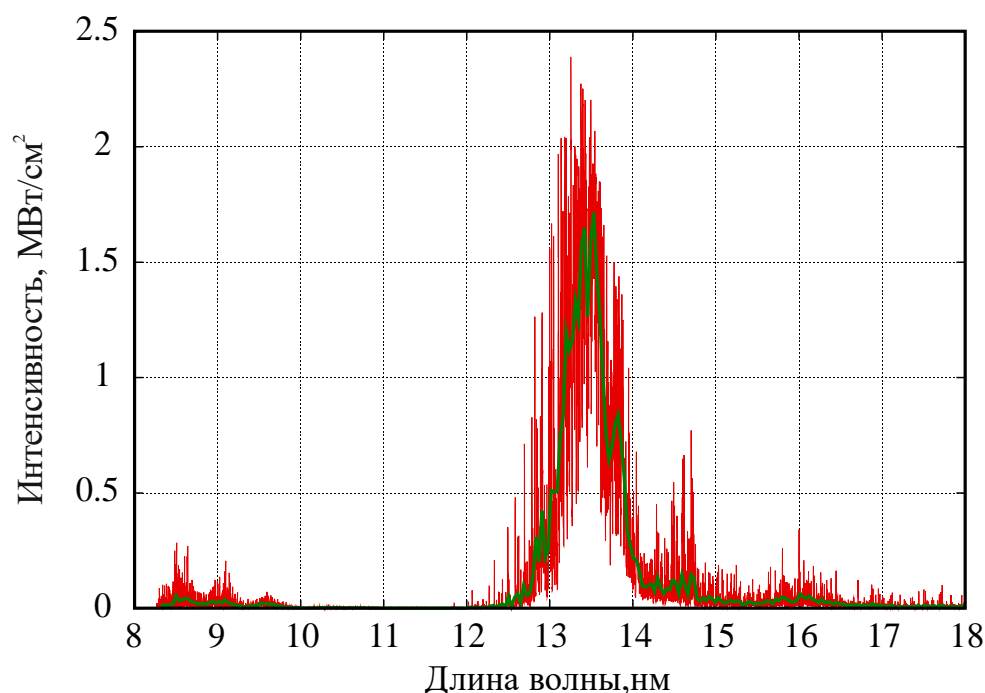


Рис. 33. Спектр излучения цилиндрического столба плазмы олова с радиусом  $R = 100$  мкм при температуре  $T = 32$  эВ и плотности электронов  $N_e = 10^{19}$  1/см³. Детальный расчёт с 20000 групп фотонов (красная кривая) и расчёт с помощью методики RUSAM на 100 группах (зелёная кривая)

## Литература

1. THERMOS – комплекс программ и банк атомных данных [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://keldysh.ru/thermos>.
2. NIST Atomic Spectra Database (version 4.0) [Электронный ресурс] / Y. Ralchenko [et al.]. – Режим доступа: <http://physics.nist.gov/asd>.
3. VizieR [Электронный ресурс] / F. Ochsenbein [et al.]. – Режим доступа: <http://vizier.u-strasbg.fr>.
4. NIFS DATABASE [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://dbshino.nifs.ac.jp>.
5. IAEA AMDIS ALADDIN Database [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www-amdis.iaea.org/ALADDIN/>.
6. Loboda P.A. SPECTR-W3 [Электронный ресурс] / P.A. Loboda. – Режим доступа: <http://spectr-w3.snz.ru>.
7. The HDF Group – Information, Support, and Software [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.hdfgroup.org>.
8. Nikiforov A.F. Quantum-statistical models of hot dense matter. Methods for computation opacity and equation of state. / A.F. Nikiforov, V.G. Novikov, V.B. Uvarov. – Switzerland: Birkhäuser, 2005. – 428 p.
9. Gu M.F. The flexible atomic code / M.F. Gu // Canadian Journal of Physics. – 2008. – Vol. 86. – № 5. – P. 675-689.
10. Gu M.F. Flexible Atomic Code (FAC) [Электронный ресурс] / M.F. Gu, E. Stambulchik. – Режим доступа: <https://www-amdis.iaea.org/FAC/>.
11. Cowan R.D. Interface to Los Alamos Atomic Physics Codes [Электронный ресурс] / R.D. Cowan. – Режим доступа: <http://aphysics2.lanl.gov/tempweb/>.
12. Kramida A.E. Cowan code package for atomic physics [Электронный ресурс] / A.E. Kramida. – Режим доступа: <http://das101.isan.troitsk.ru/cowan.htm>.
13. Comparison and analysis of collisional-radiative models at the NLTE-7 workshop / H.-K. Chung [et al.] // High Energy Density Physics. – 2013. – Vol. 9. – № 4. – P. 645-652.
14. Iglesias C.A. Spin-orbit interaction effects on the Rosseland mean opacity / C.A. Iglesias, F.J. Rogers, B.G. Wilson // The Astrophysical Journal. – 1992. – Vol. 397. – № 2. – P. 717-728.
15. Laboratory measurement of opacity for stellar envelopes / P.T. Springer [et al.] // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 1997. – Vol. 58. – № 4-6. – P. 927-935.
16. Rogers F.J. The OPAL opacity code: New results / F.J. Rogers, C.A. Iglesias // Lawrence Livermore National Laboratory Preprints. – 1994. – № UCRL-JC-119032.
17. Новиков В.Г. Расчет спектров многозарядных ионов по модели Хартри-Фока-Слэтера в приближении связи промежуточного типа /

- В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2001. – № 65. – С. 34.
18. EUV Sources for Lithography : SPIE Press Monographs. Vol. PM149 / ed. V. Bakshi LCCN: 2005025505. – Bellingham, Wash.: SPIE Publications, 2006. – 1057 p.
19. Rozsnyai B.F. Relativistic Hartree-Fock-Slater Calculations for Arbitrary Temperature and Matter Density / B.F. Rozsnyai // Physical Review A. – 1972. – Vol. 5. – № 3. – P. 1137–1149.
20. Никифоров А.Ф. Описание состояния вещества в области высоких температур на основе уравнений самосогласованного поля / А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров // Численные методы механики сплошной среды. – 1973. – Т. 4. – С. 114-119.
21. Rozsnyai B.F. Collisional-radiative average-atom model for hot plasmas / B.F. Rozsnyai // Physical Review E. – 1997. – Vol. 55. – № 6. – P. 7507-7521.
22. Moszkowski S.A. On the Energy Distribution of Terms and Line Arrays in Atomic Spectra / S.A. Moszkowski // Progress of Theoretical Physics. – 1962. – Vol. 28. – № 1. – P. 1-23.
23. Вичев И.Ю. Моделирование спектров излучения плазмы вольфрама / И.Ю. Вичев, В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная // Математическое моделирование. – 2008. – Т. 20. – № 7. – С. 93-106.
24. NIST ASD Lines Holdings [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [http://physics.nist.gov/cgi-bin/ASD/lines\\_pt.pl](http://physics.nist.gov/cgi-bin/ASD/lines_pt.pl).
25. XML Schema for Atoms, Molecules and Solids [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www-amdis.iaea.org/xsams>.
26. Development of new standards for exchange of atomic and molecular data / Y. Ralchenko [et al.]. – AIP, 2009. – P. 207-216.
27. GENIE: A General Internet Search Engine for Atomic Data [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www-amdis.iaea.org/xsams>.
28. Отдел атомной спектроскопии института спектроскопии РАН (ИСАН) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://das101.isan.troitsk.ru/>.
29. McGuinness C. Robert D. Cowan's Atomic Structure Code [Электронный ресурс] / C. McGuinness. – Режим доступа: <https://www.tcd.ie/Physics/people/Cormac.McGuinness/Cowan/>.
30. Churilov S.S. Analysis of the spectra of In XII–XIV and Sn XIII–XV in the far-VUV region / S.S. Churilov, A.N. Ryabtsev // Optics and Spectroscopy. – 2006. – Vol. 101. – № 2. – P. 169-178.
31. Churilov S.S. Analyses of the Sn IX–Sn XII spectra in the EUV region / S.S. Churilov, A.N. Ryabtsev // Physica Scripta. – 2006. – Vol. 73. – № 6. – P. 614-619.

32. Ryabtsev A.N. Spectra of rubidium-like Pd X-Sn XIV ions / A.N. Ryabtsev, E.Y. Kononov, S.S. Churilov // *Optics and Spectroscopy*. – 2008. – Vol. 105. – № 6. – P. 844-850.
33. Space Research Software [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.space-research.org/>.
34. Salzmann D. Atomic Physics in Hot Plasmas : International series of monographs on physics 97 / D. Salzmann. – Oxford University Press, 1998.
35. Вайнштейн Л.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий / Л.А. Вайнштейн, И.И. Собельман, Е.А. Юков. – Москва: Наука, 1979.
36. Regemorter H. van. Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres / H. van Regemorter // *Astrophysical Journal*. – 1962. – Vol. 136. – P. 906.
37. Lotz W. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to  $Z=108$  / W. Lotz // *Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei*. – 1970. – Vol. 232. – № 2. – P. 101-107.
38. Younger S.M. Electron-impact ionization cross sections for highly ionized hydrogen- and lithium-like atoms / S.M. Younger // *Phys. Rev. A*. – 1980. – Vol. 22. – № 1. – P. 111-117.
39. Захаров В.С. Моделирование ионизационного состава плазмы аргона с учетом быстрых электронов / В.С. Захаров, В.Г. Новиков // *Математическое моделирование*. – 2008. – Т. 20. – № 10. – С. 3-13.
40. Mihalas D. Stellar atmospheres : A Series of books in astronomy and astrophysics / D. Mihalas LCCN: 77013211. – San Francisco: W. H. Freeman, 1978. – 632 p.
41. Абрамов В.А. Перенос излучения в плазме. / В.А. Абрамов, В.И. Коган, В.С. Лисица // *Вопросы теории плазмы* / сост. М.А. Леонтович, Б.Б. Кадомцев. – Москва: Энергоиздат, 1982. – Вып. 12. – С. 114-155.
42. Hybrid atomic models for spectroscopic plasma diagnostics / S.B. Hansen [et al.] // *High Energy Density Physics*. – 2007. – Vol. 3. – № 1-2. – P. 109-114.
43. Abdallah J.J. The reduced detailed configuration accounting (RDCA) model for NLTE plasma calculations / J.J. Abdallah, M.E. Sherrill // *High Energy Density Physics*. – 2008. – Vol. 4. – № 3-4. – P. 124–130.
44. Novikov V.G. Radiative unresolved spectra atomic model / V.G. Novikov, K.N. Koshelev, A.D. Solomyannaya // *Physics of Extreme States of Matter - 2010 XXV International Conference on Equations of State for Matter*. – Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia: Chernogolovka, 2010. – P. 21-24.
45. Моделирование источников EUV-излучения с учетом детальной кинетики, включенной in-line в программу радиационной газодинамики / Д.А. Ким [и др.] // *Математическое моделирование*. – 2013. – Т. 25. – № 7. – С. 89–102.

46. Sharma G. A fast parallel Gauss Jordan algorithm for matrix inversion using CUDA / G. Sharma, A. Agarwala, B. Bhattacharya // *Computers & Structures*. – 2013. – Vol. 128. – P. 31-37.
47. Новиков В.Г. Спектральные характеристики плазмы, согласованные с излучением / В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная // *Теплофизика Высоких Температур*. – 1998. – Т. 36. – № 6. – С. 858–864.
48. Novikov V.G. Modeling of non-equilibrium radiating tungsten liners / V.G. Novikov, S.V. Zakharov // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. – 2003. – Vol. 81. – № 1-4. – P. 339-354.
49. Calculation of tin emission spectra in discharge plasma: The influence of reabsorption in spectral lines / V.G. Novikov [et al.] // *High Energy Density Physics*. – 2007. – Vol. 3. – № 1-2. – P. 198-203.
50. RZLINE code modeling of distributed tin targets for laser-produced plasma sources of extreme ultraviolet radiation / K.N. Koshelev [et al.] // *Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS*. – 2012. – Vol. 11. – № 2. – P. 29802-1-29802-1.

