

Федеральное государственное учреждение
«Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша
Российской академии наук»

На правах рукописи

Вичев Илья Юрьевич

Моделирование плазмы в столкновительно-излучательном равновесии

1.2.2. – математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор технических наук
Валько Виктор Васильевич

Москва – 2022

Оглавление

Введение	7
Глава 1. Модель столкновительно-излучательного равновесия	33
1.1. Уравнения модели	34
1.2. Выражения для скоростей процессов	37
1.3. Коэффициент поглощения и излучательная способность	45
1.4. Уравнение состояния	49
1.5. Влияние плотностных эффектов	50
1.6. Влияние горячих электронов	53
1.7. Численные методы	54
1.8. Выводы к первой главе	64
Глава 2. Согласованные решения уравнения переноса излучения в одномерной геометрии с кинетической системой	66
2.1. Уравнение переноса излучения	67
2.2. Решение для плоскопараллельной геометрии	68
2.3. Решение для сферической геометрии	78
2.4. Решение для цилиндрической геометрии	83
2.5. Алгоритм согласования	89
2.6. Выводы ко второй главе	91
Глава 3. Исследования физико-химических свойств высокотемпературной плазмы	92
3.1. Эффекты плотности в плазме алюминия и железа	93
3.2. Горячие электроны в плазме ванадия	112
3.3. Исследование оптически прозрачной и плотной плазмы в разных геометриях	120
3.4. Коэффициент прохождения через слой кремниевой плазмы	131
3.5. Выводы к третьей главе	144
Заключение	146
Список литературы	149

Обозначения и сокращения

БД – база данных

ЛТР – локальное термодинамическое равновесие

МХФС – модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера

РГД – радиационная газовая динамика

СБ – Саха-Больцмана

СИР – столкновительно-излучательное равновесие

СИМ – столкновительно-излучательная модель

СП – модель Стюарта-Пьятта

СКУ – система кинетических уравнений

УПИ – уравнение переноса излучения

УРС – уравнение состояния

УТС – управляемый термоядерный синтез

ЭВМ – электронно-вычислительная машина

ЭК – модель Экера-Кролла

ЭУФ – экстремальный ультрафиолет

DB – data base

CL – continuum lowering

CRE – collisional-radiative equilibrium

EK – Ecker-Kröll

FAC – flexible atomic code

IPD – ionization potential depression

LTE – local thermodynamic equilibrium

MPI – message passing interface

NIF – National Ignition Facility

NIST – National Institute of Standards and Technology

NLTE – non-local thermodynamical equilibrium

QZM – quasizone model

RUSAM – radiative unresolved spectra atomic model

SB – Saha-Boltzmann

SP – Stewart-Pyatt

THERMOS_CRE – столкновительно излучательное равновесие

THERMOS_HFS – модель Хартри-Фока-Слэтера

THERMOS_QZM – квазизонная модель

THERMOS_SB – статистика Саха-Больцмана

THERMOS_TF – модель Томас-Ферми

TF – Thomas-Fermi

UTA – unresolved transition array

XFEL – X-ray free electron laser

abs – absorption

ai – autoionization

dex – collisional de-excitation

ex – collisional excitation

ir – three-body recombination

ci – collisional ionization

cs – compton scattering

dc – dielectronic capture

dr – dielectronic recombination

em – emission

phi – photoionization

phr – photorecombination

bb – bound-bound

bf – bound-free

ff – free-free

Обозначения и единицы

A – атомный вес (атомная масса) вещества, г/моль (а.е.м.);

ρ – плотность вещества, г/см³;

n_e – плотность электронов, см⁻³;

n_i – плотность атомов (ионов), см⁻³;

α – скорость, с⁻¹;

T – температура электронов, эВ;

θ – температура электронов, а.е.;

ε – энергия, а.е.;

ζ – химический потенциал, а.е.;

ω – энергия фотонов, эВ или а.е.;

σ – сечение, см²;

κ_ω – спектральный коэффициент поглощения, см²/г;

κ_ω – спектральный коэффициент поглощения, см⁻¹;

j_ω – спектральный коэффициент излучения, ТВт/(см³×эВ×ср);

I_ω – спектральная интенсивность энергии излучения, ТВт/(см²×эВ×ср);

F_ω – спектральный поток энергии излучения, ТВт/(см²×эВ);

U_ω – спектральная плотность энергии излучения, Дж/(см³×эВ);

W_ω – спектральная плотность фотонов;

τ_ω – спектральная оптическая толщина.

Константы

$a_0 = 0,529 \times 10^{-8}$ см – боровский радиус;

$c = 2,9979 \times 10^{10}$ см/с (137,03599907(44) а.е.) – скорость света;

$\nu_0 = 4,134 \times 10^{16}$ с⁻¹ – атомная единица частоты;

$N_A = 6,022 \times 10^{23}$ моль⁻¹ – постоянная Авагадро;

$\sigma = 1,028 \times 10^{-7}$ ТВТ/(см²×эВ⁴) – постоянная Стефана-Больцмана;

$\hbar = 6,582119514(40) \times 10^{-16}$ эВ×с – постоянная Планка;

$\alpha^{-1} = 137,03599907(44)$ – постоянная тонкой структуры.

Введение

За последние десятилетия на мощных лазерных и разрядных установках удалось достичь высоких плотностей энергии, что открыло новые возможности для большого спектра экспериментов – от генерации рентгеновского излучения и управляемого термоядерного синтеза до астрофизических исследований.

В настоящее время довольно широкое распространение получили источники экстремального ультрафиолетового или мягкого рентгеновского излучения [1, 2, 3]. Такие источники применяются в установках для производства микросхем с высокой плотностью упаковки, медицинском и диагностическом оборудовании различного рода и т.д. Также не прекращаются исследования способов для осуществления инерциального термоядерного синтеза [4, 5] при помощи лазеров (установки NIF [6], ЛУЧ, ИСКРА-5 [7]) и генераторов тока мегаамперного диапазона (установки Z [8], Ангара-5-1 [9, 10]). Непрерывно растущая область применения источников излучения, а также повышение требований к ним формирует широкий ряд задач и вопросов. Наряду с ростом требований к источникам растёт и необходимость в более детальной информации как по физико-химическим свойствам веществ, так и по их спектральным характеристикам.

Излучение, исходящее от плазмы, является одним из основных источников знаний об её свойствах. Будь то магнитно или инерциально управляемая плазма, плазма солнечной короны, фотоионизованная плазма, создаваемая мощными Z-пинчами, или промышленная плазма для литографии, измеренные спектры излучения которой предоставляют огромное количество информации о различных характеристиках (температура и плотность, распределение по зарядовому составу, электрические и магнитные поля и т.д.). В большинстве случаев измеренные спектры излучения или прохождения че-

рез слой плазмы довольно сложны из-за огромного числа спектральных линий, которые имеют разную форму и интенсивность. В результате надёжная интерпретация спектроскопических экспериментов достигается в основном с помощью сложных методов, позволяющих адекватно описывать происхождение, распространение и возможное поглощение фотонов в плазме. Одним из наиболее общих подходов к расчёту кинетики населённостей в плазме и её спектров является моделирование в столкновительно-излучательном равновесии (СИР).

История столкновительно-излучательного моделирования (СИМ) плазмы началась в 1960-х годах. Общая постановка проблемы определения скоростей рекомбинации и ионизации на основе кинетических уравнений баланса была сформулирована в работах Бейтса, Кингстона и Мак-Уиртера [11, 12]. Исследованиями в этой области в СССР занимались Биберман, Воробьёв и Якубов [13], Беляев и Будкер [14], Питаевский и Гуревич [15, 16, 17]. СИМ используется для получения распределений населённостей атомных уровней и радиационных свойств в плазме, которая находится в условиях, отличных от локального термодинамического равновесия (ЛТР). СИМ могут быть использованы при планировании экспериментов, для получения данных о переносе энергии излучения в радиационно-гидродинамических моделях, а также для диагностики лабораторной и астрофизической плазмы, условия которой трудно или невозможно измерить напрямую (например, температуру, плотность и распределение по зарядовым состояниям).

За прошедшие 60 лет развитие столкновительно-излучательной модели происходило с учётом разных приближений: коронального, двухуровневого, среднего иона [13, 18, 19, 20]. Это стало возможным только благодаря совершенствованию аппарата атомной физики [21, 22] и росту производительности электронных вычислительных машин (ЭВМ), которые позволили получать решение для уравнений модели в течение приемлемого времени. Разработка

вычислительных методов позволила использовать атомные данные, которые содержат тысячи энергетических состояний связанных электронов в ионах и нейтральных атомах, суммарно превышающих миллионы состояний для одного элемента.

Двумя основными конструктивными элементами СИМ являются включаемые в расчёт состояния связанных электронов и скорости элементарных процессов, которые их соединяют. Идеальным набором состояний столкновительно-излучательной модели является такой набор состояний, который одновременно строго полон и полностью детализирован. Строгая полнота для N -электронного иона означает, что все возможные перестановки N электронов во всех орбиталях оболочки с главным квантовым числом n включены в набор состояний. В полностью изолированном ионе максимальное главное квантовое число не ограничено. Таким образом, строго полная модель недостижима даже для одноэлектронных ионов. Даже эффективная полнота, под которой подразумевается сходимость в распределении зарядовых состояний с более обширной структурой, невозможна для изолированных ионов при конечной температуре, потому что населённости уровней не сходятся с увеличением главного квантового числа n . Таким образом, СИМ попадает в раздел вычислительной науки, где точное решение может быть получено теоретически, но не рассчитано даже на современной ЭВМ. Уравновешивание требований полноты набора и степени детализации состояний является важной частью искусства её использования.

Как и полнота, степень детализации состояний играет важную роль в точности СИМ. Важность детальной структуры состояний наиболее очевидна при низких плотностях, где столкновительное уширение невелико и спектральные линии излучения могут быть измерены с высокой точностью. При более высоких плотностях за счёт преобладания столкновительных процессов увеличивается населённость высоковозбуждённых состояний и распреде-

ление по зарядовым состояниям смещается в сторону ЛТР. В реальных физических системах влияние соседних частиц при увеличении плотности сокращает пространство состояний за счёт перехода состояний с высоким главным квантовым числом n в непрерывный спектр.

СИМ можно разделить на группы соответствующие используемым наборам атомных состояний. К первой группе отнесём модели, которые строятся на атомной базе данных, содержащей состояния тонкой структуры уровней (DLA [23]) и скоростей элементарных процессов, рассчитанных с использованием сложных кодов атомной физики (RCG [22], FAC [24], HULLAC [25]) в многоконфигурационном приближении. В этом случае количество уравнений в системе может превосходить несколько миллионов и для нахождения решения требуются большие вычислительные ресурсы и время. Поэтому часто прибегают к некоторым упрощениям, чтобы получить систему уравнений, решение которой можно получить за приемлемое время. Для этого производятся некоторые усреднения набора состояний (например, [26]). После того, как решение упрощённой системы получено, состояния тонкой структуры могут быть заселены в соответствии со статистикой Больцмана и могут использоваться для получения спектров с точным положением спектральных линий. В таких моделях обычно ограничено главное квантовое число $n \leq n_{max} = 6$, и учитываются двух- или трёхкратные возбуждения электрона с внешней валентной оболочки. При высоких плотностях в модели требуется добавлять специальные эффекты понижения границы непрерывного спектра, и так как в них не учитываются многократные возбуждения электронов, то может не хватать полноты, чтобы обеспечить высокоточные распределения зарядовых состояний. Хотя положения линий в этих моделях так же точны, как и лежащие в их основе атомные данные, соотношения интенсивностей спектральных линий не всегда могут использоваться для диагностики плотности плазмы.

Ко второй группе можно отнести модели, которые используют атом-

ные базы данных, построенные на основе релятивистских или нерелятивистских состояний [27], усредненных по конфигурациям (UTA [28], MUTA [26], RTA [29, 30, 31]) или суперконфигурациям (STA [32]). Данный подход позволяет расширить набор состояний и добавить оболочки с более высоким главным квантовым числом $n \leq n_{max} = 8$, а также учитывать многократные возбуждения электронов с валентной оболочки и возбуждения с внутренних оболочек. Эти расширения полноты в пространстве состояний улучшают точность получаемых распределений по зарядовым состояниям и потерям на излучение как при высоких, так и при низких плотностях вещества. Хотя полученные спектры не могут быть использованы для диагностики плотности на основе интенсивностей рекомбинационных спектральных линий, их можно применять для оценки температуры на основе наблюдаемых распределений зарядовых состояний.

К третьей группе можно отнести модели, основанные на использовании водородоподобного приближения с учётом экранировки для построения полного набора состояний (FLYCHK [33, 34] и DCA [35]). С помощью этой группы моделей можно рассчитывать структуру уровней и скоростей элементарных процессов для произвольного набора суперконфигураций по мере необходимости в рамках одного расчёта. Такие модели на несколько порядков быстрее и значительно более полные по учитываемым состояниям, что в свою очередь позволяет получать достоверные распределения по кратностям ионизации в широком диапазоне плотностей, но при этом они дают только приближённую оценку потерь на излучение. Так как получаемые спектры трудно сопоставлять с экспериментальными данными, то в этих моделях для построения спектров обычно используют сторонние данные об атомной структуре, которые включают расщепление подоболочек. Для заселённостей подоболочек используется распределение Больцмана внутри нерелятивистских водородоподобных суперконфигураций $(n_1)^{N_1} (n_2)^{N_2} \dots$. Но полученные таким образом

спектры можно использовать лишь для грубых оценок. С точки зрения спектроскопической точности, эти модели не очень надёжны для диагностики плазмы, но чрезвычайно полезны в качестве вспомогательных средств для экспериментального прогнозирования и достаточно быстры для использования в кодах радиационной газовой динамики (РГД). Кроме того, по ним довольно точно можно определять необходимый набор состояний для расчётов с помощью детальных моделей СИР.

Четвёртая группа моделей основана на объединении двух принципов построения пространства состояний. В этих моделях для решения исследуемой задачи используется требуемая степень детализации, но при этом учитывается затрачиваемое на расчёт время. В качестве примера реализации такой гибридной модели можно привести модель, в которой решение стартует с относительно полного набора сильно усреднённых состояний (суперсостояний), а затем эти суперсостояния детализируются на последовательных итерациях поиска решения в приближении СИР, пока не будет достигнута сходимость в распределении по кратностям ионизации и потерям на излучение [36]. Другим примером является модель, которая объединяет ограниченную базу данных с тонкой структурой состояний и более обширным набором, усреднённых по конфигурациям или суперконфигурациям состояний [37]. Состояния тонкой структуры обеспечивают хорошее согласие с экспериментальными положениями спектральных линий и их интенсивностями при низких плотностях; состояния, усреднённые по конфигурациям, обеспечивают разумное описание излучения из высоковозбуждённых и многократно возбужденных состояний, а полнота обеспечивается суперконфигурациями, которые определяются в результате предварительного расчёта по водородоподобной модели, которая динамическим образом расширяет набор состояний до достижения сходимости распределения по кратностям ионизации и потерям на излучение. Третий пример модели из рассматриваемой группы – это модель со смешанной

структурой состояний. Расчёт проводится на базе усреднённых состояний по конфигурациям или суперконфигурациям с заменой сильных переходов на детальные [38]. Предложенная в данной работе усовершенствованная модель соответствует третьему примеру и может быть отнесена к четвертой группе. Эти модели со смешанной структурой могут использоваться для получения надёжных распределений по кратностям ионизации и потерь на излучение, а также для сравнения спектров излучения и поглощения с экспериментальными. Но их сложнее реализовать, чем модели с однородной структурой состояний, потому что они требуют объединения структур данных, имеющих совершенно разные свойства [39, 40].

Отдельно можно выделить группу моделей, которые хорошо работают при высоких плотностях – модели ионных сфер, в которых поиск волновых функций проводится для орбиталей nl или nlj в самосогласованном поле фиктивного среднего атома. В моделях среднего атома присутствуют оболочки с нецелыми числами заполнения, что позволяет согласованным образом описывать плотную плазму, так как снижение границы непрерывного спектра учитывается в рамках самой модели [41, 42]. Средний атом полностью описывается небольшим набором (десятками) частично заполненных орбиталей, при этом строгая полнота набора состояний легко достигается. Однако модели среднего атома, как правило, дают не очень хорошую спектральную точность, поскольку для вычисления положений спектральных линий требуется наличие определенных конфигураций. Использовать модели среднего атома для расчётов в СИР непросто, так как тяжело описать дважды возбужденные состояния, за счёт которых происходит важный процесс диэлектронной рекомбинации [43].

Все перечисленные выше модели, а также программы, где эти модели реализованы, довольно сложны и, следовательно, требуют верификации.

Одним из способов верификации моделей и программ, разработанных на

их основе, является сравнение результатов расчётов с экспериментально измеренными данными – например, спектрами пропускания или излучения. При этом сравнение с экспериментом – это всегда достаточно сложная задача, так как зачастую плазма нестационарна и неоднородна по пространству, а измеряемые спектры являются по сути интегральными, хотя в некоторых случаях могут иметь и временную развёртку, и угловое распределение. Другим способом верификации кодов является их перекрёстное сравнение между собой на специально подобранных задачах, постановка которых содержит значения электронной температуры, плотности и размера, наличие внешнего поля излучения, концентрации и температуры быстрых электронов и др. Концепция всестороннего сравнения неравновесных (NLTE) кодов зародилась на Opacity Code Workshops [44], где исследовались проблемные области в равновесных ЛТР кодах. Основная идея проверки NLTE моделей заключается в разработке серий тестовых случаев, которые бы подчёркивали различные особенности кинетики населённости плазмы. Такой подход представляется логичным при верификации компьютерных кодов, так как чрезвычайно сложно провести эксперимент по кинетике населённости плазмы, который обеспечил бы однозначный набор независимых параметров плазмы – таких, как плотность и температура, а также кинетические характеристики – например, распределение ионов по степеням ионизации. Сложившаяся ситуация потребовала разработки вычислительных методов, направленных на сравнение различных моделей и компьютерных кодов, используемых в кинетическом моделировании населённости плазмы. Первый семинар NLTE [45] был проведён в 1996 году в Национальном институте стандартов и технологий (NIST). Затем был проведён виртуальный онлайн-семинар [46], где было предложено несколько случаев для моделирования, а их результаты были разосланы участникам для онлайн-обсуждения. С тех пор совещания стали проводиться каждые два года [45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52]. Важно отметить, что эти семинары не толь-

ко позволяют исследовать применимость кодов к моделированию плазмы в различных состояниях, но также дают возможность проводить обширные дискуссии о возникающих проблемах, физических эффектах и обсуждать идеи новых экспериментов для уточнения моделей. Опыт, накопленный за почти 20-тилетнюю историю проведения семинаров NLTE, был собран и опубликован в виде сборника статей, объединённых под общим названием “Modern methods in collisional-radiative modeling of plasmas” (“Современные методы столкновительно-излучательного моделирования в плазме”) [20].

В семинарах принимают участие коды из разных институтов/лабораторий и стран: ATOMIC [53, 27, 54] из Лос-Аламосской национальной лаборатории (США), SCSF [40] и SCRAM [37, 39] из Сандийских национальных лабораторий (США), CRETIN [55] из Ливерморской национальной лаборатории (США), DEDALE [56] из Комиссариата по атомной и альтернативным видам энергии (Франция), DLAZY [57] из Оборонного научно-технического университета НОАК (Китай), CRAC из Института Вейцмана (Израиль). С 2005 г. на семинарах по сравнению неравновесных кодов принимает участие программный комплекс THERMOS [58, 59], разрабатываемый в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (Россия).

Вычислительный комплекс программ THERMOS включает в себя набор кодов для расчёта термодинамических и радиационных свойств как равновесной (ЛТР), так и неравновесной плазмы (НЛТР) (см. рисунок 1). На рисунке представлена схема, где синим цветом выделена область, которая соответствует исследованиям, проведённым в данной диссертационной работе.

Расчёты равновесной плазмы проводятся на основе модели среднего атома [60]. На текущий момент доступны три варианта: модель Томаса-Ферми (THERMOS_TF), модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера (THERMOS_HFS) и квазизонная модель (THERMOS_QZM) [61]. Кроме того, для равновесной плазмы может быть использовано приближение Саха-Больцмана (THERMOS_SB).

При моделировании неравновесной плазмы система кинетических уравнений решается в стационарном приближении, что соответствует модели СИР. В рамках данной диссертационной работы проведено подробное описание модели [59] и на её основе выполнена разработка программы THERMOS_CRE.

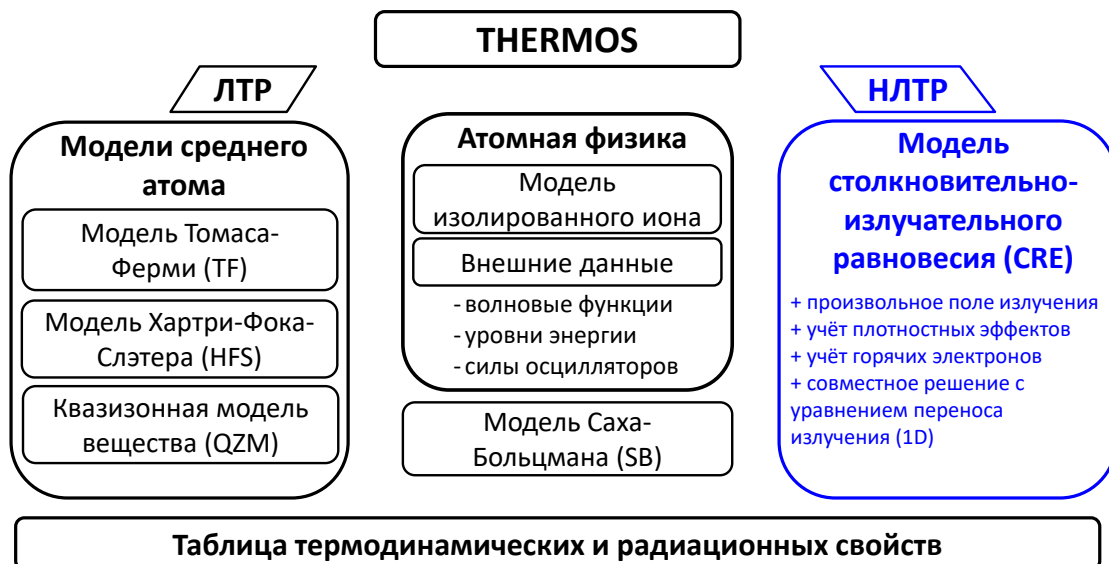


Рис. 1. Структура программного комплекса THERMOS

Коды THERMOS_SB и THERMOS_CRE в качестве входных данных используют базу атомных данных. Расчёт базы атомных данных для вещества проводится на основе модели изолированного иона с автоперебором нерелятивистских конфигураций внутри иона согласно заданному критерию [62]. Комплекс включает в себя модуль, который позволяет уточнить положение спектральных линий и сил осцилляторов с использованием данных из детальных атомных кодов (RCG [22], FAC [24], HULLAC [25]) или из атомных баз данных (NIST [63], Spectr-W3 [64] и др.), или известных экспериментальных данных.

Для описания лабораторной плазмы в рамках данной работы разработана программа THERMOS_Layer, в которой реализован алгоритм согласованного решения системы кинетических уравнений с уравнением переноса излучения и расчёта выхода излучения для заданной конфигурации плазмы в одномер-

ной геометрии – неоднородный бесконечный плоский слой, шар и бесконечный цилиндр, неоднородные по радиусу [65].

Получаемые с помощью комплекса программ THERMOS таблицы термодинамических и радиационных свойств используются различными научными организациями РФ: ФИАН, РНЦ Курчатовский институт, РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ, ИСАН, ТРИНИТИ для полномасштабного моделирования экспериментов [66, 67, 68, 69].

Актуальность работы. Математическое моделирование имеет в науке и производстве широкое применение – оно служит инструментом, с помощью которого можно прогнозировать свойства веществ в определённых условиях, объяснять результаты экспериментов, а также удешевлять процессы разработки наукоёмких установок. Изучение поведения веществ и их свойств в экспериментах, проводимых как на современных установках – лазерных (PEARL, Луч, NIF, XFEL) и разрядных (Ангара 5-1, Z) и многих других, так и с помощью компьютерного моделирования, позволяет продвинуться в решении актуальных проблем современной физики. Накопленные знания о свойствах веществ и рост точности экспериментальных данных ведёт к потребности в развитии моделей, используемых при математическом моделировании и разработке численных кодов на их основе. Эволюция современной компьютерной техники и рост вычислительных мощностей позволяют расширять возможности моделирования. Таким образом, работа по развитию методов и программ для детального изучения и моделирования процессов, протекающих в плазме, является актуальной.

Полномасштабное моделирование экспериментов, проводимых на современных установках, зачастую требует согласованного решения системы уравнений радиационной газовой динамики в трёхмерной постановке совместно с решением системы кинетических уравнений. Поиск решения задачи в такой формулировке не представляется возможным даже с учётом существующих

мощностей современных суперЭВМ. Поэтому при расчётах используются разные приближения: одни – для решения уравнения переноса излучения, другие – для коэффициентов поглощения и излучательной способности.

На протяжении многих лет разными научными коллективами по всему миру ведётся работа по развитию моделей и разработке программ для изучения свойств веществ в разнообразных, в том числе экстремальных, состояниях. В ИПМ им. М.В. Келдыша РАН в отделе №6 “Вычислительная физика и кинетические уравнения” коллективом авторов ([Новиковым В.Г.], Соломянной А.Д., Вичевым И.Ю., Грушиным А.С, Кимом Д.А.) выполняется разработка вычислительного комплекса программ THERMOS. В его основе лежат работы А.Ф. Никифорова, В.Б. Уварова и В.Г. Новикова в области разработки квантово-статистических моделей и итерационных методов решения нелинейных систем уравнений.

При развитии комплекса THERMOS основная часть работ была посвящена описанию свойств высокотемпературной плазмы, находящейся в условиях локального термодинамического равновесия, а также описанию свойств неравновесной плазмы в *приближении среднего атома*.

В рамках данной работы проведена разработка методов, алгоритмов и программ для математического моделирования характеристик неравновесной плазмы в приближении столкновительно-излучательного равновесия на основе *атомных баз данных* с учётом таких физических явлений, как плотностные эффекты, отклонение распределения электронов от Максвеловского. Также получены согласованные решения кинетической системы совместно с уравнением переноса в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии. Прделанная работа позволяет существенно расширить круг задач решаемых с помощью комплекса программ THERMOS.

Важно отдельно отметить, что на текущий момент в России не существует аналогов вычислительного комплекса программ THERMOS с таким же

набором возможностей для моделирования термодинамических и радиационных свойств веществ в широкой области температур и плотностей.

Цель диссертационной работы состоит в усовершенствовании модели и приближений, используемых при моделировании радиационных и термодинамических свойств плазмы в условиях столкновительно-излучательного равновесия, которые позволяют достичь лучшего согласия с экспериментальными данными, получаемыми на современных установках, а также с результатами моделирования по независимым программам.

Научная задача, решаемая в диссертации, состоит в развитии математических моделей, совершенствовании численных методов и алгоритмов, а также их реализации в виде конкретных компьютерных программ, позволяющих выполнять серийные расчёты термодинамических и радиационных свойств излучающей плазмы с учётом эффектов неравновесности на современных высокопроизводительных ЭВМ с параллельной архитектурой.

Направления научных исследований:

1. Развитие моделей и подходов, используемых для расчёта оптических и термодинамических свойств веществ в случае отсутствия локального термодинамического равновесия.
2. Проведение численных экспериментов и верификация программ на аналитических решениях, существующих экспериментальных данных и результатах, полученных по программам зарубежных научных групп.
3. Определение области применимости предложенной модели в пространстве физических параметров – температуры и плотности вещества.

Для достижения поставленной цели потребовалось последовательно решить следующие задачи:

1. Дополнить модель столкновительно-излучательного равновесия, добавив в неё учёт плотностных эффектов по моделям снижения потенциалов ионизации Стюарта-Пятта и Экера-Кролла, а также возможность учёта относительно малой доли горячих электронов с температурой на много больше, чем температура плазмы.
2. Получить решения уравнения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии – плоской, цилиндрической и сферической, согласованные с системой кинетических уравнений в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия.
3. Построить алгоритмы для расчёта оптических и термодинамических характеристик плазмы с произвольным полем излучения в рамках модели столкновительно-излучательного равновесия, а также разработать алгоритм согласования с кинетикой решений уравнения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии (плоской, цилиндрической и сферической).
4. Разработать комплекс вычислительных программ с учётом возможности проведения расчётов на современных ЭВМ с параллельной архитектурой и встроить их в пакет программ THERMOS для расширения его функциональных возможностей.
5. Произвести верификацию разработанных программ на задачах, имеющих аналитические решения, а также путём сравнения с результатами расчётов, полученными по независимым программам, и с экспериментальными данными.
6. Определить область применимости усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия.

Научная новизна работы заключается в разработке и программной реализации алгоритма расчёта радиационных и термодинамических свойств плазмы в рамках усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия в стационарном приближении, в которой учтены эффекты плотности, наличие горячих электронов, а также в получении согласованных решений кинетической системы совместно с уравнением переноса излучения в одномерных геометриях.

Теоретическая и практическая значимость.

В теоретической части работы ценность представляют разработанные алгоритмы для расчёта оптических и термодинамических характеристик плазмы с произвольным полем излучения в рамках модели столкновительно-излучательного равновесия, найденные решения уравнения переноса излучения в одномерной геометрии совместно с системой кинетических уравнений, а также их реализация в виде отдельных программных модулей с возможностью запуска на современных ЭВМ с параллельной архитектурой. В настоящее время внедрение алгоритмов совместного решения в одномерные коды радиационной газовой динамики представляет большой интерес и является отдельной исследовательской задачей.

В практической части исследования значимость представляют сформулированная усовершенствованная модель и разработанные на её основе программные модули, которые служат инструментом для создания таблиц радиационных и термодинамических свойств любых веществ в широком диапазоне температур и плотностей. Такие таблицы используются в сложных программах радиационной газовой динамики для выполнения производственных расчётов и описания экспериментальных данных, получаемых на современных высокоэнергетических установках.

Достоверность результатов обеспечивается за счёт всесторонней верификации разработанных программ путём проведения сравнительного ана-

лиза результатов расчётов с экспериментальными данными, аналитическими решениями, а также с результатами расчётов других научных групп. Полученное согласие результатов служит подтверждением надёжности программ и достоверности получаемых с их помощью результатов, учитывая область применимости используемых моделей и приближений.

Вычислительный комплекс программ THERMOS имеет широкое применение и рекомендуется для:

- расчёта таблиц радиационных и термодинамических свойств веществ в широкой области температур и плотностей с их последующим применением в решении практических задач радиационной газовой динамики и физики плазмы;
- проведения анализа экспериментальных спектров и определения параметров плазмы – например, температуры и плотности;
- подготовки и сопровождения экспериментов по измерению радиационных свойств плазмы;
- поиска оптимальных параметров работы источников рентгеновского излучения в требуемом спектральном диапазоне.

Методология и методы исследования.

Методология исследований, выполненных в диссертационной работе, носит теоретический характер и основана на модели столкновительно-излучательного равновесия и компьютерном моделировании. Модель столкновительно-излучательного равновесия используется для описания термодинамических и оптических свойств плазмы с произвольным полем излучения. Скорости столкновительных и радиационных процессов рассчитываются на основе приближений Режемортера и Лотца, а также формулы Крамерса. Расчёт интегралов от показательных функций, содержащих экспоненту, производится с использованием аппроксимационных формул, предложенных Алленом и Хастингом. Решение системы линейных уравнений осуществляется прямым ме-

тодом Гаусса с выделением главного элемента по столбцу. Для учёта плотностных эффектов применяются приближения Стюарта-Пьятта и Экера-Кролла при расчёте величины снижения потенциалов ионизации. При описании формы спектральной линии используется профиль Фойгта, для расчёта которого применяется квадратурная формула типа Гаусса на основе полиномов Эрмита.

Согласованное решение системы кинетических уравнений и уравнения переноса излучения в одномерной геометрии находится с помощью итерационного процесса до достижения сходимости по величине радиационных потерь. Решение уравнения переноса излучения находится путём формального интегрирования.

Несмотря на свой теоретический характер, работа опирается на огромное количество накопленных экспериментальных данных.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Усовершенствованная модель столкновительно-излучательного равновесия в стационарном приближении для расчёта термодинамических и радиационных свойств плазмы с произвольным полем излучения, которая учитывает плотностные эффекты по моделям снижения потенциалов ионизации Стюарта-Пьятта и Экера-Кролла, а также может включать относительно малую долю горячих электронов с температурой намного больше, чем температура плазмы, и её реализация в виде программы **THERMOS_CRE**, дающая возможность проведения расчётов на современных ЭВМ с параллельной архитектурой.

2. Согласованные решения уравнения переноса излучения с системой кинетических уравнений в рамках усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия в стационарном приближении для одномерных модельных систем различного типа симметрии – плоской, цилиндри-

ческой, сферической, а также их реализацию в программе `THERMOS_Layer`, позволяющую проводить расчёты на современных ЭВМ с параллельной архитектурой.

3. Алгоритмы для расчёта оптических и термодинамических характеристик плазмы с произвольным полем излучения в рамках усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия, а также алгоритм согласования с кинетикой решений уравнения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии.

4. Результаты исследования моделей и разработанных программ, которые показали высокое качественное и количественное совпадение с экспериментальными данными, аналитическими решениями и результатами расчётов по независимым программам зарубежных авторов.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на конференциях в 2006 – 2022 гг.: на Международном семинаре “Супервычисления и математическое моделирование” (Саров, 2006, 2008), 16th IEEE International Pulsed Power Conference (Альбукерке, США, 2007), International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2008, 2020), на Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС (Звенигород, Москва, 2008 – 2009, 2011, 2014, 2019 – 2020), International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2009, 2019, 2021), 5-th International Workshop on Plasma Spectroscopy (Франция, 2012), на конференции “Диагностика низкотемпературной плазмы” (Москва, 2012), IX Topical Workshop “New Horizons of EUV Lithography” (Анталья, Турция, 2013), на конференции “Разностные схемы и их приложения”, посвященной 90-летию профессора В.С. Рябенского (Москва, 2013), на семинарах в рамках Летней суперкомпьютерной академии “Крупномасштабное моделирование, высокопроизводительные вычисления и обработка данных большого объема на суперкомпьютерах” (Москва, 2013), International Workshop on Extreme Ultraviolet

and Soft X-Ray Sources (Дублин, Ирландия, 2013 – 2014), 2014 International Conference on Computer Technologies in Physical and Engineering Applications (ICCTPEA) (Санкт-Петербург, 2014), The 9th NLTE Code Comparison Workshop (Париж, Франция, 2015), The 10th NLTE Code Comparison Workshop (Сан-Диего, США, 2017), The International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter (Гамбург, Германия, 2018), Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics (Москва, 2018), 5th SLSP Workshop (Врджник, Сербия, 2019), The 11th NLTE Code Comparison Workshop (Лас-Пальмас-де-Гран-Канария, Испания, 2019), Source Workshop (Held online, 2020 – 2021), на Забабахинских научных чтениях 2021 (Снежинск, 2021) XXXVII Fortov International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2022).

Публикации. Основные результаты исследований, проведённые совместно с соавторами, опубликованы в 53 печатных работах: 12 из них – статьи в рецензируемых изданиях, индексируемых в международных базах данных Scopus и/или Web of Science [70, 71, 72, 68, 69, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79], 13 из них в рекомендованных изданиях из списка ВАК [70, 71, 72, 68, 69, 75, 80, 81, 82, 65, 83, 59, 84], 1 монография [62] и 33 публикации в виде тезисов докладов. Работы [59, 84] подготовлены без соавторов.

На разработанные программы получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ [85, 86, 87].

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы.

Большая часть опубликованных работ проводилась совместно с соавторами, так как получаемые с помощью разработанных программ данные по радиационным и термодинамическим свойствам веществ использовались в кодах радиационной газовой динамики для полномасштабного моделирования экспериментов, выполняемых на больших экспериментальных установ-

ках. Поэтому соавторы в представленных работах – это разработчики кодов радиационной газовой динамики и/или те, кто проводил серийные расчёты по этим кодам, а также те, кто ставил эксперимент и выполнял измерения.

В работах [70, 76, 77] вклад автора заключался в построении модели неравновесной излучающей плазмы и её применении для моделирования спектров излучения вольфрамовой плазмы, получаемой на сильнотоочной разрядной установке Ангара-5-1. В работах [71, 72, 68, 78, 79] совместно с группами экспериментаторов и газодинамиков было проведено сопоставление результатов измерений спектральной интенсивности излучения и выходной мощности вольфрамовой плазмы с расчётами. Вклад автора заключался в проведении большого сравнительного исследования, выполненного в предположении стационарности и однородности плазмы с помощью рассматриваемой модели, а также в подготовке таблиц термодинамических и оптических характеристик плазмы вольфрама в широкой области температур и плотностей для проведения расчётов с помощью кодов радиационной газовой динамики. В работах [73, 81] вклад автора заключался в подготовке таблиц термодинамических и оптических характеристик, которые использовались для определения параметров пинчевой плазмы железа искрового вакуумного разряда с лазерным поджигом. В работе [69] описаны результаты многолетних исследований, посвящённых разработке плазменных источников экстремального ультрафиолетового излучения для литографии нового поколения, при этом вклад автора заключался в подготовке таблиц термодинамических и оптических свойств плазмы олова с требуемой детализацией в заданном спектральном диапазоне. В работе [80] вклад автора заключался в проведении расчётов с помощью разработанной модели для заданного набора случаев, определённых организаторами семинара по сравнению неравновесных кодов, и участию в семинаре с представлением полученных результатов. В работе [83] на основе разработанного автором кода было проведено исследование мето-

дов приближённого учёта неравновесности поля излучения при моделировании свойств плазмы с помощью предварительно рассчитанных таблиц термодинамических и радиационных свойств плазмы. В работе [75] вклад автора заключался в подготовке таблиц, которые использовались в расчётах особенностей генерации лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и его воздействия на вещество применительно к задачам лазерного термоядерного синтеза. В работах [82, 74, 65, 59, 84] были опубликованы основные результаты диссертационной работы, из которых [59, 84] подготовлены без соавторов.

Все представленные в диссертации результаты получены лично автором. На основании проведённых исследований сформулированы и обоснованы выводы и заключения, вошедшие в эту научную работу.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации составляет 165 страниц, из них – 148 страниц текста, включая 48 рисунков и 5 таблиц. Библиография включает 147 наименований на 17 страницах.

Содержание работы.

В первой главе изложены положения модели столкновительно-излучательного равновесия в стационарном приближении, реализованной в программе THERMOS_CRE. Модель строится на фиксированном наборе нерелятивистских конфигураций, энергии переходов, и соответствующие силы осцилляторов рассчитываются в приближении изолированного иона. Существует возможность уточнения положения спектральных линий с помощью других более сложных кодов атомной физики или корректировки на доступные экспериментальные данные. Приведены используемые приближения и формулы для расчёта сечений и скоростей столкновительных и радиационных процессов. Отдельное внимание уделяется моделям снижения потенциалов ионизации для учёта плотностных эффектов и способу учёта фиксированной доли горячих электронов с температурой много больше температуры плазмы.

Во второй главе описывается алгоритм нахождения согласованных решений системы кинетических уравнений в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия совместно с уравнением переноса излучения в одномерных геометриях, реализованный в программе **THERMOS_Layer**. Получены решения уравнения переноса излучения для бесконечного плоского слоя, шара и бесконечного цилиндра, имеющих неоднородные распределения параметров плазмы (температура и плотность) вдоль толщины или радиуса.

В третьей главе представлены результаты исследования моделей и приближений, используемых в рамках реализации оригинального алгоритма расчёта радиационных и термодинамических свойств плазмы в приближении столкновительно-излучательного равновесия с учётом эффектов плотности, горячих электронов, а также при совместном решении с уравнением переноса излучения в одномерных геометриях. Проведена верификация разработанных программ **THERMOS_CRE** и **THERMOS_Layer** путём сравнения результатов расчётов с экспериментальными данными, аналитическими решениями и с результатами расчётов по независимым программам других авторов.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Сравнение с другими работами.

В результате рассмотрения некоторых сравнительно недавних работ схожей тематики исследования сформулировано их краткое содержание и основные отличия по отношению к данной работе.

В работе Никифорова М.Г. подробно изучено математическое моделирование многоуровневого неравновесного процесса кинетики ионизации вещества под воздействием лазерного излучения в широком диапазоне частот [88]. Учёт внешнего источника излучения производится с помощью добавления в кинетическую систему уравнений энергетического баланса. Созданный комплекс программ **CoRNeK** (Collision Radiation Non-equilibrium Kinetics) пред-

назначен для проведения расчётов неравновесного (нестационарного) процесса ионизации простых веществ под воздействием лазерного излучения. При этом предполагается, что плазма однородна по температуре и плотности. Построение системы кинетических уравнений в нестационарном приближении столкновительно-радиационного равновесия основано на базе атомных данных, рассчитанной по модели Хартри-Фока-Слэтера [89].

В работе Орешкина В.И. рассмотрено моделирование излучения плотной высокотемпературной плазмы и физических процессов, протекающих при имплозии Z-пинчей [90]. Изложены методы расчёта излучения высокотемпературной плотной плазмы, основанные на использовании как стационарной, так и нестационарной ударно-излучательной модели. При построении системы кинетических уравнений учитываются элементарные процессы столкновительного возбуждения и девозбуждения электронных уровней, радиационного распада, ударной ионизации, трёхчастичной, фото- и диэлектронной рекомбинации. Расчёт поля излучения производится с помощью факторов ускользания. Скорости радиационных процессов записываются через факторы ускользания, полученные для цилиндрической геометрии. Важно отметить, что, несмотря на то, что распределение термодинамических параметров в плазменном столбе предполагается однородным, излучательные характеристики, такие, как коэффициенты поглощения и испускания, будут меняться в зависимости от радиуса, вследствие зависимости от радиуса факторов ускользания. На основе предложенной модели была разработана программа, позволяющая рассчитывать спектры веществ от водорода до криптона. Энергетический спектр ионов, кроме Ne-подобных, рассматривается в приближении усеченного H-подобного иона.

Работа Иванова Е.М. посвящена моделированию кинетики ионизации и спектральных оптических характеристик многозарядных ионов в неравновесной плазме [91]. Столкновительно-радиационная модель сформулирована

в общем случае, но рассмотрение проводится для частного случая прозрачной плазмы. В случае ЛТР используется приближение Саха-Больцмана. Из всей совокупности процессов, протекающих в плазме, рассматриваются спонтанные радиационные переходы, столкновительное возбуждение и тушение, столкновительная ионизация, трёхчастичная и диэлектронная рекомбинация, а также фоторекомбинация. Модель строится на основе доступных баз атомных данных [92, 63]. Следует отметить, что доступные базы атомных данных зачастую не являются полными с точки зрения наличия всех возможных состояний, требуемых для построения модели, особенно в случае многоэлектронных ионов. При расчёте формы спектральных линий используется лоренцевский профиль. Созданный комплекс программ ДЕСНА предназначен для проведения расчётов ионизационного состава, населённостей уровней и оптических характеристик плазмы произвольного химического состава в широком диапазоне плотностей и температур. Комплекс также может использоваться для расчёта и табулирования величин средних или среднегрупповых оптических коэффициентов. Рассчитанные таблицы констант могут использоваться в других программах радиационной газовой динамики.

Важным отличием данной диссертационной работы от представленных выше заключается в том, что автором рассмотрена стационарная модель столкновительно-излучательного равновесия для произвольных значений температуры и плотности электронов, а также произвольного поля излучения. Система уравнений кинетики состоит из уравнений с существенно различными характерными временами: зачастую характерные времена жизни возбужденных состояний много меньше времен релаксации основных состояний, и, кроме того, много меньше времен изменения термодинамических параметров плазмы.

При построении системы кинетических уравнений учитываются процессы столкновительной ионизации и трёхчастичной рекомбинации, радиацион-

ные процессы фотоионизации и фоторекомбинации, процессы автоионизации и диэлектронного захвата, приводящие к изменению кратности ионизации, а также процессы без изменения кратности ионизации – столкновительные процессы возбуждения и тушения, и радиационные процессы поглощения и излучения в спектральных линиях. В приведённых выше работах не учитывались автоионизационные состояния. При расчёте формы спектральных линий используется фойгтовский профиль, который является более точным.

Еще одним важным отличием является то, что в данной работе предложен алгоритм поиска согласованного решения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии (плоской, цилиндрической и сферической) совместно с системой кинетических уравнений. Полученные решения позволяют проводить корректный расчёт спектров для плазмы произвольной оптической толщины.

В рассмотренных выше работах ничего не говорится о том, на каком языке программирования написаны комплексы программ, также нет комментариев о возможности проведения расчётов на многопроцессорных ЭВМ.

К основным недостаткам рассматриваемой в данной диссертационной работе модели можно отнести только тот факт, что в ней не предусмотрена возможность проведения расчётов для смеси веществ. Но стоит отметить, что в комплексе программ **THERMOS** предусмотрена возможность построения таблиц термодинамический и оптических характеристик для смеси веществ на основе таблиц для отдельных элементов смеси в приближении равенства электронных плотностей, что является вполне приемлемым при высоких ионизациях вещества. В диссертационной работе была рассмотрена СИМ только в стационарном приближении. Решение нестационарной системы кинетических уравнений может быть необходимым для ряда задач, например, при расчётах воздействия высокоинтенсивными ультракороткими (десятки и сотни фемтосекунд) пучками рентгеновских фотонов на исследуемые образцы, которое

приводит к образованию фотоионизированной плазмы [93, 94, 95, 96, 97, 98]. Также не исследована проблема описания профилей спектральных линий излучения [99].

Благодарности

Автор выражает благодарность В.В. Валько (12 ЦНИИ МО РФ) за многочисленные полезные обсуждения и дискуссии; коллегам по отделу №6 (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) – А.Д. Соломянной за ценные рекомендации при разработке алгоритмов решения системы кинетических уравнений, Д.А. Киму за помощь в проведении большого числа расчётов при верификации разработанных программ, А.С. Грушину за разработку форматов хранения таблиц термодинамических и оптических свойств веществ и помощь в проведении параллельных вычислений.

Глава 1

Модель столкновительно-излучательного равновесия

Рассмотрим модель столкновительно-излучательного равновесия в стационарном приближении, а также применяемые приближения и методы для расчёта радиационных и термодинамических свойств плазмы с произвольным полем излучения. Модель описывает процессы, которые связывают населённости электронных состояний в атомах и ионах посредством скоростей радиационных и столкновительных процессов. Учитываются процессы столкновительной ионизации и трёхчастичной рекомбинации, радиационных фотоионизации и фоторекомбинации, автоионизации и диэлектронного захвата, приводящие к изменению кратности ионизации, и процессы без изменения кратности ионизации – столкновительные возбуждение и тушение, и радиационные поглощение и излучение в спектральных линиях. Для расчёта скоростей процессов используются хорошо зарекомендовавшие себя приближения Режемортера [100, 101] и Лотца [102] для скоростей столкновительных процессов возбуждения и ионизации соответственно, скорости радиационных процессов взяты из [103, 104]. Скорости фотоионизации рассчитываются на основе сечений, полученных по формуле Крамерса [105], проинтегрированных по произвольному полю излучения. Скорость процесса автоионизации рассчитывается в дипольном приближении [106]. Скорости обратных процессов вычисляются на основе принципа детального равновесия [107, 108]. Для расчёта профиля спектральной линии используется профиль Фойгта [109].

Влияние плотностных эффектов учитывается в рамках приближений Стюарта-Пьятта [110] и Экера-Кролла [111] для снижения потенциалов иони-

зации. Возможен учёт фиксированной доли горячих электронов с температурой намного больше температуры окружающей плазмы [112], при этом предполагается максвелловская функция распределения свободных электронов по энергиям.

1.1. Уравнения модели

Столкновительно-излучательная модель описывает процессы, которые связывают населённости электронных состояний в атомах и ионах посредством скоростей элементарных радиационных и столкновительных процессов. Полагаем, что плазма состоит из свободных электронов и ионов различной кратности, тогда уравнение для определения вероятности x_{ks} конфигурации Q_{ks} иона кратности k в состоянии s имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx_{ks}}{dt} = & -x_{ks} \left(\sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'} + \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'} + \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow ks'} \right) + \\ & + \sum_{s'} x_{k+1, s'} \alpha_{k+1, s' \rightarrow k, s} + \sum_{s'} x_{k-1, s'} \alpha_{k-1, s' \rightarrow k, s} + \sum_{s'} x_{ks'} \alpha_{ks' \rightarrow ks}. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Запишем систему уравнений в матричной форме:

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{X}, \quad (1.2)$$

где $\mathbf{X} \equiv \{x_{ks}\}$ – вектор вероятностей, $\mathbf{A}$ – матрица скоростей процессов для вещества с атомным номером Z , которая имеет блочно-трёхдиагональный

ВИД

$$\begin{bmatrix}
 A_{00} & R_{01} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 I_{01} & A_{11} & R_{12} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 0 & 0 & I_{k-2,k-1} & A_{k-1,k-1} & R_{k-1,k} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & \dots & 0 & I_{k-1,k} & A_{k,k} & R_{k,k+1} & 0 & \dots & 0 \\
 0 & \dots & 0 & 0 & I_{k,k+1} & A_{k+1,k+1} & R_{k+1,k+2} & \dots & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & I_{Z-2,Z-1} & A_{Z-1,Z-1} & R_{Z-1,Z} \\
 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I_{Z-1,Z} & A_{Z,Z}
 \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

При этом диагональные блоки матрицы (1.3) выглядят следующим образом:

$$A_{kk} = \begin{bmatrix} a_{k0,k0} & \dots & a_{k0,ks} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{ks,k0} & \dots & a_{ks,ks} \end{bmatrix}. \quad (1.4)$$

Диагональные элементы $a_{ks,ks}$ содержат скорости ухода из состояния s иона кратности k за счёт процессов ионизации/рекомбинации, возбуждения/тушения, поглощения/излучения:

$$a_{ks,ks} = - \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k+1,s'} - \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k-1,s'} - \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow ks'}. \quad (1.5)$$

Недиагональные элементы $a_{ks,ks'}$ содержат скорости прихода из всех состояний s' иона кратности k за счёт процессов возбуждения/тушения, поглощения/излучения, не приводящих к изменению кратности иона:

$$a_{ks,ks'} = \sum_{s'} \alpha_{ks' \rightarrow ks}.$$

Под- и наддиагональные блоки матрицы (1.3) включают в себя скорости процессов ионизации и рекомбинации соответственно:

$$I_{k-1,k} = [\alpha_{k-1,s' \rightarrow ks}], R_{k,k+1} = [\alpha_{k+1,s' \rightarrow ks}].$$

Скорость рекомбинации $R_{k-1,k}$ иона из состояния ks в состояние $k-1, s'$ получается суммированием скоростей трёхчастичной рекомбинации $\alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{ir}$, фоторекомбинации $\alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{phr}$ и диэлектронного захвата $\alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{dc}$

$$\alpha_{ks \rightarrow k-1, s'} = \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{ir} + \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{phr} + \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{dc}. \quad (1.6)$$

Скорость ионизации $I_{k,k+1}$ иона из состояния ks в состояние $k+1, s'$ получается суммированием скоростей столкновительной ионизации $\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci}$, фотоионизации $\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{phi}$ и автоионизации $\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ai}$

$$\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'} = \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci} + \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{phi} + \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ai}. \quad (1.7)$$

Скорости переходов из состояния ks в ks' без изменения кратности иона имеют вид:

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'} = \begin{cases} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} + \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{abs}, & \text{если } E_{ks} < E_{ks'}, \\ \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{dex} + \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{em}, & \text{если } E_{ks} > E_{ks'}, \end{cases} \quad (1.8)$$

где E_{ks} – энергия состояния ks , $\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex}$ и $\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{dex}$ – скорости процессов возбуждения и тушения электронным ударом, а $\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{abs}$ и $\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{em}$ – скорости процессов радиационного возбуждения (поглощения фотона) и излучения соответственно.

В случае, если в плазме скорости изменения температуры T , плотности электронов n_e и поля излучения U_ω намного меньше скоростей $\frac{d\mathbf{X}}{dt}$, то систему уравнений (1.2) можно решать в стационарном приближении, полагая $\frac{d\mathbf{X}}{dt} = 0$:

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = 0. \quad (1.9)$$

При решении системы (1.9) сумма вероятностей конфигураций должна удовлетворять условию нормировки:

$$\sum_{ks} x_{ks} = 1, \quad k = 0..Z. \quad (1.10)$$

Система уравнений (1.9) и условие (1.10) лежат в основе модели столкновительно-излучательного равновесия. Модель СИР является обобщением описания плазмы, включающей предельные случаи коронального и локального термодинамического равновесия. Области применимости приближений локального термодинамического и коронального равновесия определены в работах [113, 114].

Предлагаемый подход базируется на наборе конфигураций Q_{ks} , которые определяются целыми числами заполнения нерелятивистских уровней $N_{n\ell}^{ks}$. При расчёте скоростей столкновительных процессов ионизации и рекомбинации по формулам (1.6) и (1.7) полагается, что начальные и конечные состояния связаны соотношением $N_{n\ell}^{k-1,s'} = N_{n\ell}^{ks} + 1$. Скорости процессов без изменения кратности ионизации (1.8) в используемом подходе рассчитываются только для одноэлектронных дипольных переходов $\Delta\ell = 1$, причём $N_{n\ell}^{ks'} = N_{n\ell}^{ks} - 1$; $N_{n'\ell'}^{ks'} = N_{n'\ell'}^{ks} + 1$.

1.2. Выражения для скоростей процессов

При записи скоростей столкновительных и радиационных процессов воспользуемся следующими предположениями и приближениями.

Функция распределения свободных электронов по энергиям ε при фиксированной температуре θ предполагается максвелловской:

$$F(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\varepsilon} \theta^{-3/2} e^{-\varepsilon/\theta}. \quad (1.11)$$

Число свободных электронов с энергией ε удовлетворяет статистике Ферми-Дирака:

$$n(\varepsilon) = \left[1 + \exp \left(\frac{\varepsilon - \zeta}{\theta} \right) \right]^{-1}, \quad (1.12)$$

где ζ – химический потенциал свободных электронов.

Плотность свободных электронов в атомной ячейке n_e является постоянной. Таким образом, выполняется соотношение [60]:

$$e^{\zeta/\theta} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{\theta} \right)^{3/2} a_0^3 n_e, \quad (1.13)$$

где a_0 – боровский радиус.

1.2.1. Столкновительное возбуждение и девозбуждение

Скорость столкновительных процессов, т.е. число актов столкновения в единицу времени на ион, пропорциональна плотности свободных электронов n_e и среднему от сечения $\sigma_{ks,ks'}$ перехода иона из состояния Q_{ks} в состояние $Q_{ks'}$ с возбуждением электрона с уровня $n\ell$ на уровень $n'\ell'$, умноженного на скорость электрона $v = \sqrt{2\varepsilon}$:

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} = n_e a_0^3 \nu_0 \langle \sigma_{ks,ks'}^{ex} v \rangle = n_e a_0^3 \nu_0 \int_{\Delta\varepsilon}^{\infty} \sigma_{ks,ks'}^{ex}(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.14)$$

где ν_0 – атомная единица частоты, $F(\varepsilon)$ – функция распределения свободных электронов по энергиям. Энергия, необходимая для возбуждения электрона, определяется через энергии соответствующих конфигураций

$$\Delta\varepsilon = E_{ks'} - E_{ks}. \quad (1.15)$$

В используемом приближении при вычислениях скорости столкновительного процесса возбуждения используется формула Режемортера [101, 18]:

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} = \frac{8\pi\sqrt{\pi}}{\sqrt{6}} a_0^3 \nu_0 \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} f_{ks,ks'} \frac{e^{-y}}{y} p(y), \quad y = \frac{\Delta\varepsilon}{\theta} > 0. \quad (1.16)$$

Здесь $f_{ks,ks'}$ – сила осциллятора, включающая числа заполнения перехода $ks \rightarrow ks'$, значения множителя $p(y)$ и их аппроксимация приведены в разделе “Численные методы 1.7” (см. таблицу 1.1 и рисунок 1.4).

Скорость столкновительного процесса девозбуждения (тушения) вычисляется из скорости возбуждения с помощью принципа детального равновесия [107, 108]:

$$\alpha_{ks' \rightarrow ks}^{dex} = \frac{g_{ks}}{g_{ks'}} e^y \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex}, \quad (1.17)$$

где g_{ks} и $g_{ks'}$ – статистические веса конфигураций.

1.2.2. Ионизация и трехчастичная рекомбинация

Формулу для расчёта скорости процесса возбуждения (1.14) можно распространить на вычисление скорости процесса ионизации при переходе электрона с квантовыми числами $n\ell$ в непрерывный спектр $\varepsilon^* \lambda^*$:

$$\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci} = n_e a_0^3 \nu_0 \frac{1}{2} \int_{\varepsilon^i}^{\infty} \left(\sum_{\lambda^*} \int_0^{\varepsilon^i} \frac{d\sigma_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci}}{d\varepsilon^*} (1 - n(\varepsilon^*)) d\varepsilon^* \right) \sqrt{2\varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.18)$$

где ε – энергия налетающего электрона, $d\sigma_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci}$ – дифференциальное сечение процесса ионизации, которое необходимо просуммировать по моментам λ^* и проинтегрировать по энергиям ε^* ионизованного электрона. Энергия ионизации электрона с уровня $n\ell$ конфигурации Q_{ks} , вычисляется по формуле

$$\varepsilon^i = E_{k+1, s'} - E_{ks}. \quad (1.19)$$

Как можно видеть из формулы (1.18), при вычислении скорости процесса ионизации присутствует дополнительное суммирование по моментам и интегрирование по энергиям ионизованного электрона, что усложняет расчёты.

В предлагаемой модели при расчёте скорости процесса ионизации используется формула Лотца [102]:

$$\begin{aligned}\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci} &= \frac{\sqrt{6} \pi \sqrt{\pi}}{4} a_0^3 \nu_0 \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} N_{nl}^{ks} \frac{1}{\varepsilon^i} \int_{\varepsilon^i/\theta}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt = \\ &= 2,1 \times 10^{-8} \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} N_{nl}^{ks} \frac{E_1(\varepsilon^i/\theta)}{\varepsilon^i},\end{aligned}\quad (1.20)$$

где $E_1(z) = \int_z^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt$ – интегральная экспонента.

Для расчёта скорости обратного процесса трёхчастичной рекомбинации воспользуемся принципом детального равновесия [107, 108]:

$$\alpha_{k+1, s' \rightarrow ks}^{ir} = \exp\left(\frac{\zeta + \varepsilon^i}{\theta}\right) \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci}. \quad (1.21)$$

Подставляя выражение (1.13) в формулу (1.21), получим

$$\begin{aligned}\alpha_{k+1, s' \rightarrow ks}^{ir} &= \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{\theta}\right)^{3/2} a_0^3 n_e e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci} = \\ &= 1,17 \times 10^{-24} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci}.\end{aligned}\quad (1.22)$$

1.2.3. Автоионизация и диэлектронный захват

Автоионизационные состояния $Q^{**}(ks', n\ell)$, образующиеся при столкновении электрона с многозарядным ионом $Q(k+1, s)$, распадаются по двум каналам:

$$Q(k+1, s) + e \rightarrow Q^{**}(ks', n\ell) \begin{cases} \nearrow Q^*(ks, n\ell) + \hbar\omega; & (a) \\ \searrow Q(k+1, s) + e_{Auger}. & (б) \end{cases}$$

Здесь $Q^{**}(ks', n\ell)$ – дважды возбуждённое состояние s' иона кратности k с “автоионизирующимся” электроном с квантовыми числами $n\ell$, $Q(k+1, s)$ – состояние s иона кратности $k+1$ после процесса автоионизации, $Q^*(ks, n\ell)$ – промежуточное состояние иона после девозбуждения в присутствии возбуждённого электрона с квантовыми числами $n\ell$.

Радикационная стабилизация по каналу (а) приводит к связыванию налетающего электрона с ионом, т.е. к рекомбинации, так как после излучения второго фотона ион $Q^*(ks, n\ell)$ с одним возбуждённым электроном $n\ell$ переходит в своё стабильное состояние. Такая рекомбинация носит название диэлектронной, так как происходит в результате перехода двух электронов. Безызлучательный распад (б) приводит к упругому рассеянию электрона на ионе $Q(k+1, s)$. На рисунке 1.1 представлено схематическое изображение описанных процессов.

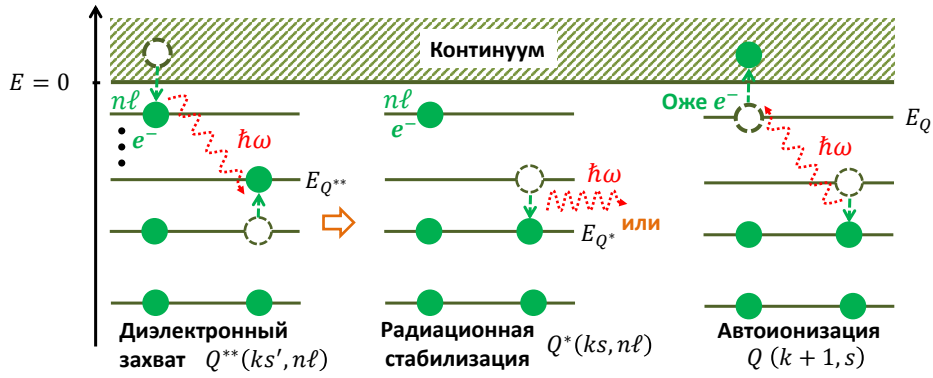


Рис. 1.1. Схематическое представление процессов

Пусть $\omega(Q^{**}, Q^*) = E_{Q^{**}} - E_{Q^*} > 0$ — энергия, выделенная при девозбуждении $Q^{**} \rightarrow Q^*$, $\varepsilon(Q^{**}, Q) = E_Q - E_{Q^{**}} > 0$ — энергия, оставшаяся при автоионизации состояния $Q^{**} \rightarrow Q$.

Скорость автоионизации с девозбуждением состояния s' в промежуточное состояние s и последующей ионизацией электрона с квантовыми числами $n\ell$ в дипольном приближении [106] имеет вид:

$$\alpha_{n\ell}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q) = \frac{2\pi\nu_0}{2(2\ell+1)} \frac{f(Q^*, Q^{**})}{\omega(Q^{**}, Q^*)} \times \sum_{\ell'=\ell\pm 1} \frac{\ell+\ell'+1}{2} \left(\left\langle R_{n\ell}(r) \left| \frac{1}{r^2} \right| R_{\varepsilon\ell'}(r) \right\rangle \right)^2, \quad (1.23)$$

где $f(Q^*, Q^{**})$ — сила осциллятора перехода (процесса возбуждения) $Q^* \rightarrow Q^{**}$.

При вычислении матричного элемента из (1.23) используется водородо-подобное приближение для волновых функций дискретного и непрерывного спектра

$$\left\langle R_{n\ell}(r) \left| \frac{1}{r^2} \right| R_{\varepsilon\ell'}(r) \right\rangle \approx \frac{\omega^2}{Z_{n\ell}} \langle r \rangle_{n\ell, \varepsilon\ell'}.$$

На его основе введём обозначение

$$f^H \equiv \sum_{\ell'=\ell\pm 1} \frac{\ell + \ell' + 1}{2} \left(\left\langle R_{n\ell}(r) \left| \frac{1}{r^2} \right| R_{\varepsilon\ell'}(r) \right\rangle \right)^2.$$

В результате для скорости процесса автоионизации получим

$$\begin{aligned} \alpha_{n\ell}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q) &= \frac{2\pi\nu_0}{2(2\ell+1)} \frac{f(Q^*, Q^{**})}{\omega(Q^{**}, Q^*)} f^H = \\ &= 1,3 \times 10^{17} \frac{1}{(2\ell+1)} \frac{f(Q^*, Q^{**})}{\omega(Q^{**}, Q^*)} f^H. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Для расчёта скорости обратного процесса диэлектронного захвата воспользуемся принципом детального равновесия:

$$\begin{aligned} \alpha_{n\ell}^{dc}(Q \rightarrow [Q^*]Q^{**}) &= \exp\left(\frac{\zeta - \varepsilon}{\theta}\right) \frac{g(Q^*)}{g(Q)} \alpha_{n\ell}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q) = \\ &= 1,17 \times 10^{-24} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon/\theta} \frac{g(Q^*)}{g(Q)} \alpha_{n\ell}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Полная скорость автоионизации конфигурации $Q^{**}(ks')$ определяется суммой по промежуточным состояниям $Q^*(ks)$:

$$\alpha^{ai}(ks' \rightarrow k+1, s) = \sum_{Q^*(ks)} \alpha^{ai}(ks'[ks] \rightarrow k+1, s)|_{\varepsilon>0}. \quad (1.26)$$

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

$$\alpha^{dr}(k+1, s \rightarrow ks') = \sum_{Q^*(ks)} \frac{\alpha^{em}(ks' \rightarrow ks) \alpha^{dc}(k+1, s \rightarrow [ks]ks')}{\alpha^{em}(ks' \rightarrow ks) + \alpha^{ai}(ks'[ks] \rightarrow k+1, s)}. \quad (1.27)$$

1.2.4. Скорости радиационных процессов

Скорость процесса радиационного возбуждения $ks \rightarrow ks'$ (поглощения фотонов в спектральной линии с профилем $\Phi_{ks,ks'}(\omega)$) может быть записана в виде

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{abs} = \nu_0 \int \frac{\sigma_{ks,ks'}^{bb} \Phi_{ks,ks'}(\omega)}{\omega} (c U_\omega) d\omega, \quad (1.28)$$

где c – скорость света, U_ω – спектральная плотность энергии излучения, $\sigma_{ks,ks'}^{bb}$ – сечение связно-связного перехода (в а.е.) из состояния Q_{ks} в состояние $Q_{ks'}$

$$\sigma_{ks,ks'}^{bb} = 2\pi^2 \alpha f_{ks,ks'}. \quad (1.29)$$

Спектральная плотность энергии излучения определяется как

$$U_\omega = \frac{1}{c} \int I_\omega d\Omega, \quad (1.30)$$

где I_ω – спектральная интенсивность излучения в элемент телесного угла $d\Omega$.

Спектральную плотность энергии излучения также можно представить в виде

$$U_\omega = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} W(\omega) = \frac{4\pi}{c} \frac{15}{\pi^5} \sigma \omega^3 W(\omega), \quad (1.31)$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ – постоянная Планка, $W(\omega)$ – усреднённое по направлениям полёта число фотонов с фиксированной поляризацией в единице фазового объёма (в случае ЛТР $W(\omega)$ задаётся распределением Бозе-Эйнштейна). Если σ выражена в ТВТ/(см²×эВ⁴), то для перевода в атомные единицы её необходимо умножить на

$$C_W = 10^{12} \times \frac{2,29 \times 10^{17} [\text{a.e.}] (a_0 [\text{см}])^2 (27,211 [\text{эВ}])^4}{\nu_0 [\text{с}^{-1}]} = 85,187 [\text{a.e.}].$$

Для скорости процесса радиационного распада при переходе $ks' \rightarrow ks$ с учётом вынужденного излучения в соответствии с принципом детального

равновесия из формулы (1.28) получаем:

$$\alpha_{ks' \rightarrow ks}^{em} = \nu_0 \frac{g_{ks}}{g_{ks'}} \exp \left(\frac{E_{ks'} - E_{ks}}{\theta} \right) \int \frac{\sigma_{ks,ks'}^{bb} \Phi_{ks,ks'}(\omega)}{\omega} \left(\frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^2} + cU_\omega \right) e^{-\omega/\theta} d\omega. \quad (1.32)$$

Полагаем, что профиль спектральной линии можно представить в виде $\Phi_{ks,ks'}(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$, $\omega_0 = E_{ks'} - E_{ks}$, тогда приближённо имеем:

$$\begin{aligned} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{abs} &= \nu_0 2\pi^2 \alpha f_{ks,ks'} \left(\frac{\nu_0 a_0}{\pi c} \right)^2 \omega_0^2 W(\omega_0) = \\ &= 3,21 \times 10^{10} f_{ks,ks'} \omega_0^2 W(\omega_0), \end{aligned} \quad (1.33)$$

$$\alpha_{ks' \rightarrow ks}^{em} = 3,21 \times 10^{10} \frac{g_{ks}}{g_{ks'}} f_{ks,ks'} \omega_0^2 [1 + W(\omega_0)]. \quad (1.34)$$

Аналогично запишем формулы для скоростей фотоионизационных и фоторекомбинационных процессов:

$$\begin{aligned} \alpha_{ks \rightarrow k+1,s'}^{phi} &= \nu_0 \int \frac{\sigma_{nl}^{bf}(\omega)}{\omega} (cU_\omega) d\omega, \\ \alpha_{k+1,s' \rightarrow ks}^{phr} &= \nu_0 \exp \left(\frac{\zeta + \varepsilon^i}{\theta} \right) \frac{g_{ks}}{g_{k+1,s'}} \int \frac{\sigma_{nl}^{bf}(\omega)}{\omega} \left(\frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^2} + cU_\omega \right) e^{-\omega/\theta} d\omega, \end{aligned}$$

где ε^i – энергия ионизации, определяемая по формуле (1.19).

В водородоподобном приближении сечение процесса фотоионизации (в а.е.) с уровня $n\ell$ и эффективным зарядом ядра Z_{nl} может быть записано в виде [115]:

$$\sigma_{nl}^{bf}(\omega) = \frac{64\pi}{3\sqrt{3}} \alpha \frac{n}{Z_{nl}^2} \left(\frac{\varepsilon^i}{\omega} \right)^3. \quad (1.35)$$

Также формула Крамерса (1.35) может быть записана в виде:

$$\sigma_{nl}^{bf}(\omega) = \frac{64\pi}{3\sqrt{6}} \alpha \frac{Z_{nl} (\varepsilon^i)^{3/2}}{2n^2} \frac{1}{\omega^3} \Big|_{\omega \geq \varepsilon^i}. \quad (1.36)$$

При вычислениях скоростей процессов фотоионизации и фоторекомбинации используется формула (1.36), где $Z_{nl} \equiv Z_{nl}^{(k)}$ – эффективный заряд уровня $n\ell$ для иона заданной кратности k .

Тогда для скорости процесса фотоионизации получаем следующее выражение:

$$\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{phi} = u_{nl}^{ks} \int_{\varepsilon^i/\theta}^{\infty} \frac{W(t)}{t} dt, \quad (1.37)$$

где

$$\begin{aligned} u_{nl}^{ks} &= \nu_0 \frac{64\pi}{3\sqrt{6}} \alpha \left(\frac{\nu_0 a_0}{\pi c} \right)^2 N_{nl}^{ks} \frac{Z_{nl}^{(k)} (\varepsilon^i)^{3/2}}{2n^2} = \\ &= 4,45 \times 10^{10} \frac{Z_{nl}^{(k)} (\varepsilon^i)^{3/2}}{2n^2}. \end{aligned}$$

Соответственно, скорость процесса фоторекомбинации вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} \alpha_{k+1, s' \rightarrow ks}^{phr} &= \nu_0 \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{\theta} \right)^{3/2} a_0^3 n_e e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} u_{nl}^{ks} \int_{\varepsilon^i}^{\infty} \frac{e^{-\omega/\theta}}{\omega} [1 + W(\omega)] d\omega = \\ &= 1,17 \times 10^{-24} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} u_{nl}^{ks} \int_{\varepsilon^i/\theta}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} [1 + W(t)] dt. \end{aligned} \quad (1.38)$$

1.3. Коэффициент поглощения и излучательная способность

При фиксированных температуре электронов θ , плотности ионов n_i и спектральной плотности энергии излучения U_ω из решения системы (1.9) определяются вероятности состояний ионов x_{ks} и средний заряд $Z_0 = \sum_{ks} kx_{ks}$.

Спектральные коэффициент поглощения и излучательная способность записываются в виде:

$$\begin{aligned} \kappa_\omega &= n_i \left\{ (1 - e^{-\omega/\theta}) \left[\sum_{ks} x_{ks} \sum_{ks'} \sigma_{ks, ks'}^{bb}(\omega) \Phi_{ks, ks'}^{abs}(\omega) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{ks} x_{ks} \sigma_{ks}^{bf}(\omega) + \sigma^{ff}(\omega) \right] + \sigma^{cs}(\omega) \right\}, \end{aligned} \quad (1.39)$$

$$j_\omega = n_i \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^3 c^2} \left\{ \sum_{ks'} x_{ks'} \sum_{ks} \sigma_{ks',ks}^{\text{bb}}(\omega) \Phi_{ks',ks}^{em}(\omega) + \right. \\ \left. + \sum_{ks'} x_{ks'} \sigma_{ks'}^{\text{fb}}(\omega) + e^{-\omega/\theta} \sigma^{\text{ff}}(\omega) \right\}, \quad (1.40)$$

где $\Phi(\omega)$ – форма спектральной линии, $\sigma^{\text{bb}}(\omega)$, $\sigma^{\text{bf}}(\omega)$, $\sigma^{\text{ff}}(\omega)$, $\sigma^{\text{cs}}(\omega)$ – сечения процессов поглощения в линиях (1.29), фотоионизации, тормозного поглощения и комптоновского рассеяния соответственно. Слагаемое $e^{-\omega/\theta}$ в формуле (1.39) представляет собой поправку на вынужденное излучение. Следует отметить, что такой вид поправки справедлив только в случае ЛТР.

1.3.1. Форма спектральной линии

Воспользуемся приближением полного перераспределения по частотам внутри спектральной линии, в котором совпадают профили излучения и поглощения: $\Phi_{ks,ks'}^{abs}(\omega) = \Phi_{ks',ks}^{em}(\omega) = \Phi_{ks,ks'}(\omega)$. Это приближение широко используется на практике, но оно не всегда работает.

Форма спектральной линии, которая одновременно включает эффекты, влияющие на время жизни уровня и на смещение положения центра спектральной линии, описывается профилем Фойгта [109]:

$$\Phi_{ks,ks'}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}D} K \left(\frac{\omega - \omega_{ks,ks'}}{D}, \frac{\Gamma}{D} \right), \quad (1.41)$$

где $\omega_{ks,ks'} = E_{ks'} - E_{ks}$ – положение центра спектральной линии, $\Gamma = \Gamma_{ks,ks'}$ – лоренцевская полуширина спектральной линии [60], D – гауссова ширина спектральной линии.

В рассматриваемой модели гауссова ширина учитывает – эффект Доплера, уширение спектральных линий за счёт эффективного учёта спин-орбитального взаимодействия, а также сеточное уширение:

$$D = \sqrt{(\sigma^D)^2 + 2(\sigma^{jj})^2 + (\delta\omega)^2}.$$

Уширение линии за счёт эффекта Доплера в плазме с температурой θ определяется как

$$\sigma^D = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{2\theta}{M}}, \quad (1.42)$$

где $M = 1823 A$ – масса иона.

Для исключения потерь на излучение в узких спектральных линиях используется сеточное уширение $\delta\omega$, определяемое шагом расчётной сетки по энергии фотонов. При моделировании экспериментальных спектров в гауссову ширину также может быть включено инструментальное уширение.

Уширение спектральной линии за счёт эффективного учёта jj -связи σ^{jj} вычисляется с использованием статистического приближения Мошковского [116].

Лоренцевская ширина спектральной линии $\gamma = 2\Gamma$ из формулы (1.41) учитывает радиационное уширение, уширение за счёт взаимодействия со свободными электронами и ионное уширение:

$$\gamma = \gamma^{(r)} + \gamma^{(e)} + \gamma^{(i)}.$$

Радиационная ширина спектральной линии, соответствующая одноэлектронному переходу $ks \rightarrow ks'$, определяется суммой ширин верхнего и нижнего уровней

$$\gamma_{ks \rightarrow ks'}^{(r)} = \gamma_{ks}^{(r)} + \gamma_{ks'}^{(r)}.$$

В используемой модели время жизни конфигурации Q_{ks} определяется суммой скоростей радиационных процессов возбуждения и распада во все возможные конфигурации $Q_{ks''}$:

$$\gamma_{ks}^{(r)} = \hbar \sum_{s''} \alpha_{ks \rightarrow ks''}^{abs} + \hbar \sum_{s''} \alpha_{ks \rightarrow ks''}^{em}.$$

Аналогично выписываются формулы для уширения спектральной линии за счёт взаимодействия со свободными электронами

$$\gamma_{ks \rightarrow ks'}^{(e)} = \gamma_{ks}^{(e)} + \gamma_{ks'}^{(e)},$$

в этом случае ширина уровня $n\ell$ конфигурации Q_{ks} определяется суммой скоростей столкновительных процессов возбуждения и девозбуждения на всевозможные уровни $n''\ell''$ конфигурации $Q_{ks''}$:

$$\gamma_{ks}^{(e)} = \hbar \sum_{s''} \alpha_{ks,ks''}^{ex} + \hbar \sum_{s''} \alpha_{ks,ks''}^{dex}.$$

Вычисление эффективной лоренцевской ширины спектральной линии за счёт эффекта Штарка $\gamma_{ks \rightarrow ks'}^{(i)}$ проводится с использованием двухуровневого приближения [82, 117].

1.3.2. Сечение фотоионизации

Для сечения процесса фотоионизации удобно воспользоваться простым приближением Крамерса [115] – см. формулу (1.36). Тогда сечение фотоионизации электрона с энергией ε^i (1.19) из состояния ks с числами заполнения $N_{n\ell}^{ks}$ определяется так:

$$\sigma_{ks}^{\text{bf}}(\omega) = \sum_{n\ell} N_{n\ell}^{ks} [1 - n(\omega - \varepsilon^i)] \sigma_{n\ell}^{\text{bf}}(\omega). \quad (1.43)$$

Сечение процесса фоторекомбинации электрона в состояние ks' можно записать в виде:

$$\sigma_{ks'}^{\text{fb}}(\omega) = \sum_{n\ell} \left[2(2\ell + 1) - N_{n\ell}^{ks'} \right] n(\omega - \varepsilon^i) \sigma_{n\ell}^{\text{bf}}(\omega). \quad (1.44)$$

1.3.3. Сечение тормозного поглощения

Выражение для сечения тормозного поглощения имеет вид [60]:

$$\sigma(\omega) = 2\pi^2 \alpha a_0^2 \sum_{\ell} \sum_{\ell'=\ell\pm 1} \iint 2(2\ell + 1) n(\varepsilon) [1 - n(\varepsilon')] \delta(\omega + \varepsilon - \varepsilon') f_{\varepsilon\ell, \varepsilon'\ell'} d\varepsilon d\varepsilon',$$

где ε – энергия электрона до поглощения фотона, $\varepsilon' = \varepsilon + \omega$ – энергия электрона после поглощения фотона с энергией ω .

Сечение процесса тормозного поглощения будем рассматривать в приближении Борна-Эльверта [118] с учётом вырождения:

$$\sigma^{\text{ff}}(\omega) = \frac{16\pi}{3\sqrt{3}} \alpha a_0^2 \frac{Z_0^2}{\omega^3} \int_0^\infty n(\varepsilon) [1 - n(\varepsilon')] g(\varepsilon', \varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.45)$$

где

$$g(\varepsilon', \varepsilon) = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon'}{\varepsilon}} \ln \left(\frac{\sqrt{\varepsilon'} + \sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon'} - \sqrt{\varepsilon}} \right) \frac{1 - \exp \left[-2\pi Z_0 / \sqrt{2\varepsilon'} \right]}{1 - \exp \left[-2\pi Z_0 / \sqrt{2\varepsilon} \right]}.$$

1.3.4. Сечение комптоновского рассеяния

Для расчёта сечения процесса комптоновского рассеяния используется аппроксимационная формула [119], основанная на формуле Клейна-Нишины, и на результатах, приведённых в работе [120]:

$$\sigma^{\text{cs}}(\omega) = \frac{8\pi}{3} \alpha^4 a_0^2 Z_0 f(\omega, T),$$

где ω – энергия фотона, T – температура вещества (здесь ω и T выражены в кэВ),

$$f(\omega, T) = \begin{cases} 1 & \text{при } T < 2 \text{ или } \omega < 0,25; \\ a(\omega)(T - 2) + b(\omega) & \text{при } T \geq 2 \text{ и } \omega \geq 0,25, \end{cases}$$

$$a(\omega) = \begin{cases} 2,04 \times 10^{-5} \omega - 6,44 \times 10^{-4} \sqrt{\omega} + 5,13 \times 10^{-3} & \text{при } \omega < 210; \\ 3,04 \times 10^{-6} \omega - 1,455 \times 10^{-4} \sqrt{\omega} + 1,53 \times 10^{-3} & \text{при } \omega \geq 210, \end{cases}$$

$$b(\omega) = \begin{cases} 6,622 \times 10^{-4} \omega - 5,365 \times 10^{-2} \sqrt{\omega} + 1,1116 & \text{при } \omega < 210; \\ 8,455 \times 10^{-4} \omega - 5,157 \times 10^{-2} \sqrt{\omega} + 1,0273 & \text{при } \omega \geq 210. \end{cases}$$

1.4. Уравнение состояния

При расчёте уравнения состояния (УРС) в области применимости рассматриваемой модели хорошо зарекомендовало себя приближение идеального

газа:

$$P_e = \frac{\theta}{v} Z_0, \quad P_i = \frac{\theta}{v},$$

$$P = P_e + P_i = \frac{\theta}{v} (Z_0 + 1), \quad (1.46)$$

$$E_e = \left[\frac{3}{2} \theta Z_0 + \sum_{ks} x_{ks} E_{ks} - E_0 \right], \quad E_i = \frac{3}{2} \theta,$$

$$E = E_e + E_i = \left[\frac{3}{2} \theta (Z_0 + 1) + \sum_{ks} x_{ks} E_{ks} - E_0 \right], \quad (1.47)$$

где $v = \frac{4}{3} \pi r_0^3$ – объём атома, $E_0 = E_{ks}|_{k=0,s=0}$ – энергия основного состояния нейтрального атома. В формуле (1.47) приближение идеального газа используется только для свободных электронов, а для связанных электронов применяется более точный подход: последовательно учитываются кинетическая энергия связанных электронов и энергия их взаимодействия с ядром и друг с другом.

Исследование и сопоставление результатов с более сложными моделями УРС [121, 122, 123, 124, 125, 126] выходят за рамки данной работы.

Вычисления по формулам (1.46) – (1.47) дают значения термодинамических функций в атомных единицах. Для перехода к обычным единицам необходимо умножить давление на 29,418 ТПа, а внутреннюю энергию – на 2,626/ A МДж/г (A – атомная масса).

1.5. Влияние плотностных эффектов

Столкновительно-излучательные модели зачастую строятся на основе заранее рассчитанных баз атомных данных, полученных в приближении изолированного иона, но применяются к плазме, где атомы и ионы взаимодействуют с другими частицами и полями. Это взаимодействие приводит к иска-

жению волновых функций, уровней энергии и вероятностей переходов. Очевидно, что по мере увеличения плотности эти эффекты нарастают. Из-за взаимодействия с окружающими ионами и электронами изменяется атомный потенциал, в котором более высокие состояния перестают быть дискретными, а энергия, необходимая для ионизации оставшихся связанных электронов, уменьшается (см. рисунок 1.2).

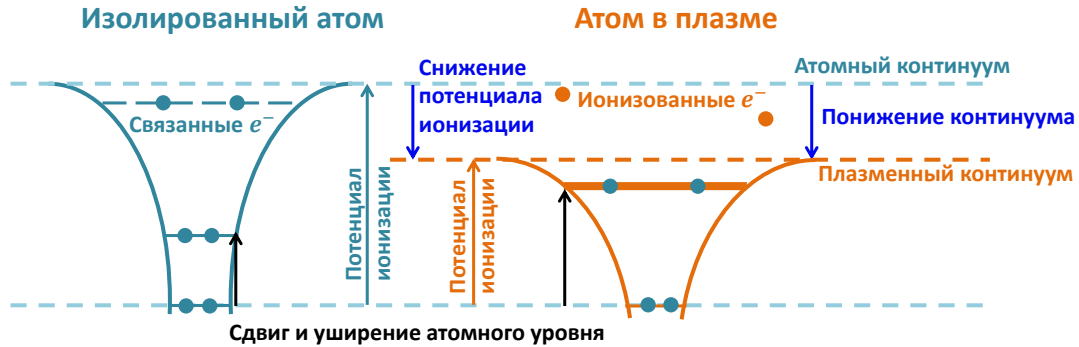


Рис. 1.2. Схематическое представление снижения потенциала ионизации

Это явление называют снижением потенциала ионизации (Ionization Potential Depression – IPD) или понижением границы непрерывного спектра (Continuum Lowering – CL). Так как это приводит к увеличению ионизации, то явление иногда называют ионизацией давлением. Базы атомных данных, полученные в приближении изолированного иона, имеют ограниченную область применимости (идеальная плазма). С целью расширить её на область высоких плотностей в нашу модель были добавлены приближения для оценки величины снижения потенциалов ионизации Стюарта-Пьятта (СП) [110] и Экера-Кролла (ЭК) [111]. Поскольку существуют экспериментальные подтверждения справедливости обеих моделей, оба приближения были реализованы в коде. Недавние измерения величины снижения потенциалов ионизации, проведённые с помощью лазера на свободных электронах LCLS [94], подтверждают приближение ЭК, тогда как общепринятое приближение СП не согласуется с данными измерений. С другой стороны, проведённые впо-

следствии измерения величины снижения потенциалов ионизации в экспериментах по лазерному сжатию [127, 128] подтвердили справедливость приближения СП и продемонстрировали худшее согласие с приближением ЭК.

1.5.1. Снижение потенциалов ионизации

Для оценки снижения потенциала ионизации (в а.е.) по модели СП для иона кратности k , вещества с атомным весом A , при плотности вещества ρ используется следующая формула:

$$\Delta I^{SP}(k) = \frac{3(k+1)}{2r_0},$$

где $r_0 = 1,388 \left(\frac{A}{\rho}\right)^{1/3}$ – радиус электронейтральной атомной ячейки. Если задана электронная плотность n_e , то $\rho = n_e \frac{A}{Z_0 N_A}$. Приведённая формула представляет собой предельный случай (приближение ионной сферы), который реализуется при сильной ион-ионной неидеальности, когда дебаевский радиус мал по сравнению с радиусом атомной ячейки.

В модели ЭК для оценки снижения потенциала ионизации (в а.е.) введён дополнительный множитель, напрямую зависящий от среднего заряда иона Z_0 в плазме:

$$\Delta I^{EK}(k) = \frac{(k+1)}{r_{EK}},$$

где радиус $r_{EK}^3 = \frac{r_0^3}{1 + Z_0}$.

Если система уравнений (1.9) решается при заданной концентрации свободных электронов, то в качестве первого приближения при расчёте радиуса атомной ячейки предлагается использовать

$$r_0 = 1,388 \left(\frac{k' N_A}{n_e}\right)^{1/3}, \quad k' = \max\{k, 1\},$$

а для корректировки $r_{EK} = r_{EK}|_{Z_0=k}$.

Более точный подход к расчёту радиуса атомной ячейки и r_{EK} предполагает проведение итераций по Z_0 с корректировкой базы атомных данных на каждой итерации.

Процесс исключения высоковозбуждённых конфигураций в используемой базе атомных данных в зависимости от заданной плотности (электронной или вещества) производится для каждой кратности ионизации k перед построением системы кинетических уравнений.

1.6. Влияние горячих электронов

Влияние на процессы столкновительных ионизации и возбуждения может оказывать наличие в плазме горячих или, как их еще называют, быстрых электронов, т.е. электронов с большой энергией. Присутствие таких электронов приводит к заметному изменению ионизационного состава плазмы даже при их относительно малой концентрации.

При учёте горячих электронов с температурой T_h много больше температуры плазмы T_e ($T_h \gg T_e$) распределение электронов по энергиям можно представить в виде суммы:

$$F(\varepsilon) = (1 - f_h)F(T_e, \varepsilon) + f_h F(T_h, \varepsilon),$$

где $F(\varepsilon)$ – максвелловская функция распределения свободных электронов (1.11), ε – энергия свободных электронов, f_h – относительная концентрация горячих электронов.

Так как температуры сильно отличаются ($T_h \gg T_e$), то максимумы функций распределения разнесены на достаточное расстояние, поэтому скорости процессов могут быть также представлены в виде суммы

$$\alpha(T_e, T_h) \approx (1 - f_h)\alpha(T_e) + f_h \alpha(T_h),$$

$$\alpha = n_e a_0^3 \nu_0 < \sigma F(\varepsilon) > .$$

В отличие от прямых столкновительных процессов, т.е. электрон-ионных столкновительных процессов, которые ведут к увеличению заряда иона ($\alpha^{ex} \sim \alpha^{ex}(T_e, T_h)$, $\alpha^{ci} \sim \alpha^{ci}(T_e, T_h)$), присутствие горячих электронов в плазме не оказывает существенного влияния на скорости обратных процессов ($\alpha^{dex} \sim \alpha^{ex}(T_e)$, $\alpha^{ir} \sim \alpha^{ci}(T_e)$). Это связано с тем, что сечения таких процессов, в том числе рекомбинационных, достигают своих максимальных значений при околопороговых энергиях, т.е. вблизи границы между дискретным и непрерывным спектрами энергий, и эти области в полной мере определяют значения скоростей процессов. Поэтому для электронов с высокой энергией сечения рекомбинационных процессов не вносят каких-либо заметных изменений в значения скоростей, и учёт такого влияния горячих электронов не является необходимым [112]. В рассматриваемой модели полагается, что скорости процессов фотоионизации и автоионизации ($\alpha^{phi} \sim \alpha^{phi}(T_e)$, $\alpha^{ai} \sim \alpha^{ai}(T_e)$), а также обратных процессов фоторекомбинации и диэлектронного захвата ($\alpha^{phr} \sim \alpha^{phi}(T_e)$, $\alpha^{dc} \sim \alpha^{ai}(T_e)$) не зависят от горячих электронов.

1.7. Численные методы

1.7.1. Решение системы кинетических уравнений

В общем случае размерность системы уравнений (1.9) для вещества с атомным номером Z составляет $N = \sum_{k=0}^Z N_k(Q)$, где $N_k(Q)$ – число конфигураций для иона кратности k . Как правило, система уравнений решается для заранее определённого диапазона ионов разной кратности от $k_{\min}$ до $k_{\max}$, тогда размерность системы составит $N^* = \sum_{k=k_{\min}}^{k_{\max}} N(Q_k)$. В итоге получаем однородную систему линейных алгебраических уравнений, из которой можно

исключить одно из уравнений как линейно зависимое, заменив его условием нормировки (1.10).

Очевидно, что исключить лучше уравнение, соответствующее наиболее вероятной конфигурации Q_{k^*0} (основное состояние иона кратности k^*). Полагая концентрацию данного состояния равной единице ($x_{k^*0} = 1$), а соответствующий столбец переносим в правую часть, тогда система преобразуется к виду

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{B}.$$

Матрица $\tilde{\mathbf{A}}$ имеет блочно-трехдиагональный вид и является разреженной (см. рисунок 1.3). Размерность полученной матрицы при этом составит $N^* - 1$.

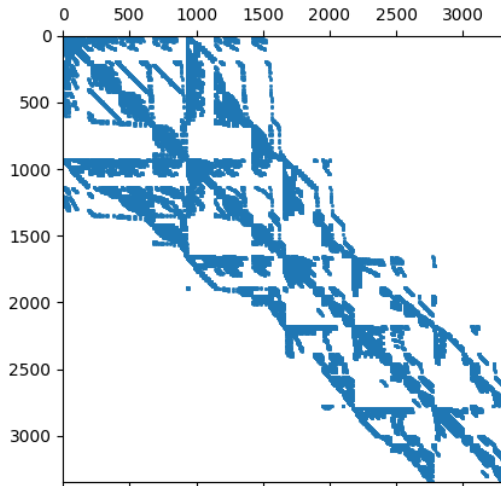


Рис. 1.3. Пример вида матрицы $\tilde{\mathbf{A}}$

Решение системы усложняется тем, что в плазме многоэлектронных атомов реализуется огромное количество возможных состояний, а скорости элементарных процессов могут отличаться на много порядков. Для решения систем линейных алгебраических уравнений известно множество не только прямых, но и итерационных методов.

Ввиду своей простоты реализации для решения блочно-трёхдиагональной системы был выбран классический прямой метод Гаусса с выделением главного элемента по столбцу [129], хотя он и не является оптимальным по скорости.

Полученное решение $\mathbf{X}$ системы уравнений (1.9) требуется перенормировать согласно условию нормировки (1.10).

1.7.2. Интегральная экспонента

При расчёте скоростей процессов столкновительной и радиационной ионизации приходится вычислять интегралы от показательных функций, содержащих экспоненту (см. формулы (1.20, 1.38)).

Для действительного аргумента z и $z > 0$ интегральная экспонента может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} E_1(z) &= \int_z^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt = \\ &= -\gamma - \ln z - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-z)^n}{nn!}, \end{aligned} \quad (1.48)$$

где $\gamma = 0,57721566490153286\dots$ – постоянная Эйлера (Эйлера-Маскерони).

При аппроксимации интегральной экспоненты (1.48) будем использовать формулы, предложенные Алленом [130] и Хастингом [131]:

$$E_1^a(z) = \begin{cases} -\ln z + a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + a_3 z^3 + a_4 z^4 + a_5 z^5, & \text{для } 0 \leq z < 1, \\ \frac{e^{-z}}{z} \frac{b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + b_3 z^3 + z^4}{c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + c_3 z^3 + z^4}, & \text{для } z \geq 1, \end{cases}$$

где $a_{0-5} = [-0,57721566; 0,99999193; -0,24991055; 0,05519968; -0,00976004; 0,00107857]$, $b_{0-3} = [0,2677737343; 8,6347608925; 18,0590169730; 8,5733287401]$, $c_{0-3} = [3,9584969228; 21,0996530827; 25,6329561486; 9,5733223454]$. С относительной ошибкой $\epsilon = \left| \frac{E_1(z) - E_1^a(z)}{E_1(z)} \right|$, которая составляет 2×10^{-7} и 2×10^{-8} соответственно.

Расчёт прямых и обратных скоростей радиационного процесса ионизации (1.37 – 1.38) требует вычисления следующих интегралов

$$F_1(x) = \int_x^\infty \frac{W(t)}{t} dt,$$

$$F_2(x) = e^x \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} [1 + W(t)] dt.$$

Функция $W(\omega)$ предполагается заданной на интервалах по энергии фотонов $[\omega_i, \omega_{i+1}]$.

Первый интеграл вычисляется методом трапеций, а второй сводится к сумме интегральных экспоненциальных функций:

$$F_1(x) \approx \sum_i \frac{1}{2} \left(\frac{W(x_i)}{x_i} + \frac{W(x_{i+1})}{x_{i+1}} \right) (x_{i+1} - x_i),$$

$$\begin{aligned} F_2(x) &= e^x \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt + e^x \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} W(t) dt = \\ &= e^x E_1(x) + e^x \sum_i W(x_i) \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{e^{-t}}{t} dt = \\ &= A(x) + e^x \sum_i W(x_i) B(x_i, x_{i+1}) = \\ &= A(x) + \sum_i W(x_i) [e^{x-x_i} A(x_i) - e^{x-x_{i+1}} A(x_{i+1})], \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} A(x) &= e^x E_1(x), \\ B(x_1, x_2) &= \int_{x_1}^{x_2} \frac{e^{-t}}{t} dt = \int_{x_1}^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt - \int_{x_2}^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt = \\ &= e^{-x_1} A(x_1) - e^{-x_2} A(x_2). \end{aligned}$$

1.7.3. Скорость процесса возбуждения

При расчёте скоростей прямых и обратных столкновительных процессов возбуждения (1.16,1.17) табличные значения функции $p(y)$ [101] для ионов (см. таблицу 1.1) заменяются аппроксимацией (см. рисунок 1.4)

$$p(y) \approx \frac{0,2}{\ln 2} \ln \left(2 + \frac{1}{1,78 y} \right), \quad (1.49)$$

тогда имеем:

$$\begin{aligned} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} &= \frac{8\pi\sqrt{\pi}}{\sqrt{6}} a_0^3 \nu_0 \frac{0,2}{\ln 2} \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} f_{ks,ks'} \frac{e^{-y}}{y} \ln \left(2 + \frac{1}{1,78 y} \right) = \\ &= 3,07 \times 10^{-8} \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} f_{ks,ks'} \frac{e^{-y}}{y} \ln \left(2 + \frac{1}{1,78 y} \right). \end{aligned} \quad (1.50)$$

Таблица 1.1. Значения множителя $p(y)$ для атомов и ионов

$p(y)$	атомы	ионы
$< 0,005$	$\frac{\sqrt{3}}{2\pi} E_1(y)$	$\frac{\sqrt{3}}{2\pi} E_1(y)$
0,01	1,160	1,160
0,02	0,956	0,977
0,04	0,758	0,788
0,1	0,493	0,554
0,2	0,331	0,403
0,4	0,209	0,290
1	0,100	0,214
2	0,063	0,201
4	0,040	0,200
10	0,023	0,200
> 10	$0,066 y^{-1/2}$	0,200

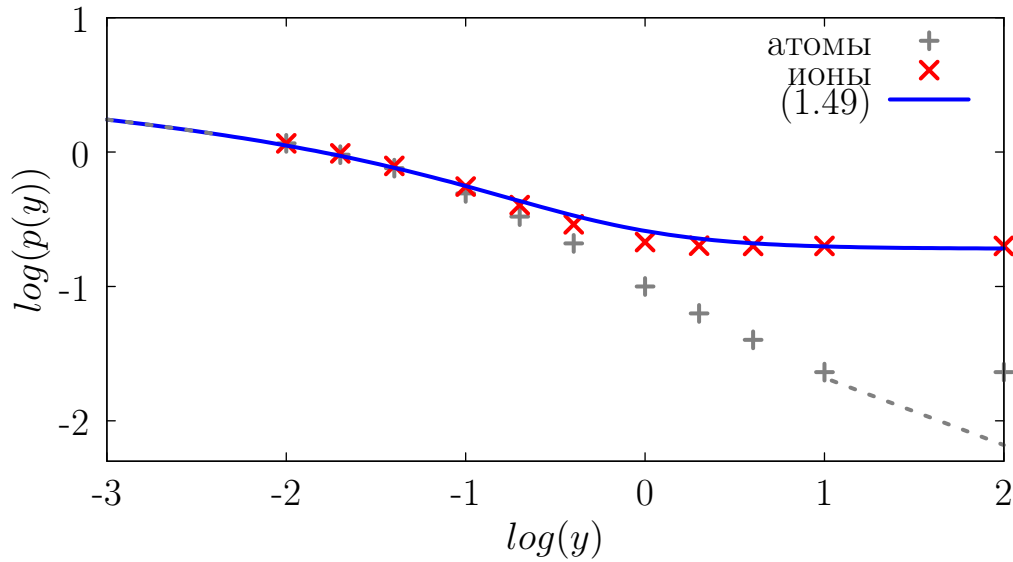


Рис. 1.4. Значения множителя $p(y)$ для атомов и ионов по данным из таблицы 1.1 и их аппроксимация для ионов по формуле (1.49)

1.7.4. Сечение тормозного поглощения

При расчёте сечения процесса тормозного поглощения (1.45) требуется вычислить определённый интеграл. При $\zeta \leq 0$ используется квадратурная формула типа Гаусса [132]:

$$\int_0^\infty e^{-x^2} f(x) dx = \sum_{i=1}^N a_i f(x_i),$$

где x_i и a_i – узлы и веса полиномов Эрмита (см. таблицу 1.2). Для чисел $a_i \ll 1$ используется сокращенная запись: $0,(2)3804639 = 0,003804639$.

Тогда расчётные формулы можно переписать в виде:

$$\sigma^{\text{ff}}(x) = \begin{cases} C_{\text{brem}} e^{\zeta/\theta} \sum_{i=1}^N a_i G\left(A_{\text{brem}}, x_i, \sqrt{(x_i)^2 + x}\right), & -\zeta \geq 0; \\ C_{\text{brem}} h_b \sum_{i=1}^{n_b} b_i \frac{G\left(A_{\text{brem}}, y_i, \sqrt{(y_i)^2 + x}\right)}{1 + \exp\left((y_i)^2 - \zeta/\theta\right)}, & -\zeta < 0, \end{cases} \quad (1.51)$$

где

$$C_{\text{brem}} = \frac{32\pi}{3\sqrt{3}} \alpha a_0^2 \frac{Z_0}{\theta^2 x^3} (1 - e^{-x}) = 3,96 \times 10^{-18} \frac{Z_0}{\theta^2 x^3} (1 - e^{-x}),$$

$$A_{\text{brem}} = \frac{2\pi Z_0}{\sqrt{2\theta}}, \quad b_i = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left((y_i)^2 - \zeta/\theta + x\right)},$$

$$y_i = y_0 + (i - 1)h_b, \quad y_0 = \sqrt{\max\{0, \zeta/\theta - u\}}, \quad h_b = \frac{\sqrt{u + \zeta/\theta} - y_0}{n_b},$$

при фиксированных параметрах $n_b = 1000, u = 20$. Функция $G(a, b, c)$ в (1.51) вычисляется следующим образом:

$$G(a, b, c) = \begin{cases} \frac{\sqrt{3}}{\pi} 2b(1 - \exp(-a/c)), & b \leq 10^{-2}; \\ \frac{\sqrt{3}}{\pi} b \frac{1 - \exp(-a/c)}{1 - \exp(-a/b)} \frac{1}{2} \ln \frac{(c + b)^2 + 3\Gamma/(2\theta)}{(c - b)^2 + 3\Gamma/(2\theta)}, & b > 10^{-2}, \end{cases}$$

где $\Gamma = \frac{Z_0}{r_0\theta}$ – параметр неидеальности.

Таблица 1.2. Узлы x_i и веса a_i полиномов Эрмита

N	x_i	a_i
10	0,2453407	0,4622437
	0,7374737	0,2866755
	1,2340762	0,1090172
	1,7385377	0,02481052
	2,2549740	0,(2)3243773
	2,7888061	0,(3)2283386
	3,3478546	0,(5)7802556
	3,9447640	0,(6)1086069
	4,6036824	0,(9)4399341
	5,3874809	0,(12)2229394

1.7.5. Понижение границы непрерывного спектра

Важно отметить, что энергия ионизации ε^i в формуле (1.36) не учитывает сдвига за счёт эффектов плотности, при этом сечение отсчитывается от порога ионизации с учётом эффектов плотности $\omega \in [\varepsilon^i - \Delta\varepsilon^D, \infty]$.

Так как при расчётах используется база атомных данных, полученная в приближении изолированного иона с ограничением по главному квантовому числу $n \leq n_{\max}$, то требуется искусственным образом понизить границу непрерывного спектра, чтобы устранить некорректное поведение коэффициента поглощения.

Величину искусственного понижения границы непрерывного спектра для иона кратности k оценим, исходя из водородоподобного приближения для энергии внешних уровней (слабозаполненных оболочек):

$$\Delta\varepsilon_k = \min [\varepsilon^i] \frac{n_{\max}^2}{(n_{\max} + 1)^2}.$$

При этом сдвиг энергии ионизации $\Delta\varepsilon^D$ выбирается на основе оценок снижения потенциала ионизации ΔI_k^{IPD} по моделям СП или ЭК (работает при высоких плотностях) и понижения границы непрерывного спектра $\Delta\varepsilon_k$ (работает при низких плотностях) для иона кратности k :

$$\Delta\varepsilon^D = \max\{\Delta I_k^{IPD}, \Delta\varepsilon_k\}.$$

При расчёте вклада связно-свободных переходов (1.43, 1.44) в коэффициент поглощения (1.39) и излучательную способность (1.40) учтём влияние плотностных эффектов посредством следующей подстановки:

$$\varepsilon^i = \varepsilon_0^i - \Delta\varepsilon^D,$$

где ε_0^i – энергия ионизации изолированного иона.

1.7.6. Профиль Фойгта

При расчёте фойгтовского профиля (1.41) спектральной линии необходимо вычислить интеграл следующего вида [118]:

$$K(x, y) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ye^{-s^2}}{(x-s)^2 + y^2} ds, \quad y > 0.$$

Для вычисления функции $K(x, y)$ используется квадратурная формула типа Гаусса на основе полиномов Эрмита [133]:

$$K(x, y) = \frac{e^{a^2}}{\pi} \sum_{j=1}^n \lambda_j \frac{(a + y) \cos 2as_j - (x - s_j) \sin 2as_j}{(x - s_j)^2 + (a + y)^2},$$

где s_j, λ_j – нули полинома Эрмита и числа Кристоффеля [132], расчёт значений выполняется при $a = 1$.

В табл. 1.3 приведены значения чисел Кристоффеля λ_j и нули полинома Эрмита s_j [132]. Следует отметить, что для каждого положительного значения s_j в этом случае существует также отрицательное значение $-s_j$ с тем же весом λ_j . Для чисел $\lambda_j \ll 1$ используется сокращенная запись: $0,(2)1343645747 = 0,001343645747$.

Таблица 1.3. Нули полинома Эрмита s_j и числа Кристоффеля λ_j

n	s_j	λ_j
1	0	1,772453851
2	0,7071067812	8,8862269255
3	0	1,181635901
	1,2247448714	1,2954089752
4	0,5246476233	0,8049140900
	1,6506801239	0,08131283545
5	0	0,9453087205
	0,9585724646	0,3936193232
	2,0201828705	0,01995324206
6	0,4360774119	0,7246295952
	1,3358490740	0,1570673203
	2,3506049737	0,(2)4530009906
7	0	0,8102646176
	0,8162878829	0,4256072526
	1,6735516288	0,05451558282
	2,6519613568	0,(3)9717812451
8	0,3811869902	0,6611470126
	1,1571937124	0,2078023258
	1,9816567567	0,01707798301
	2,9306374203	0,(3)1996040722
9	0	0,7202352156
	0,7235510188	0,4326515590
	1,4685532892	0,08847452739
	2,2665805845	0,(2)4943624276
	3,1909932018	0,(4)3960697726
10	0,3429013272	0,6108626337
	1,0366108298	0,2401386111
	1,7566836493	0,03387439446
	2,5327316742	0,(2)1343645747
	3,4361591188	0,(5)7640432855

1.8. Выводы к первой главе

Таким образом, в рамках данной главы была сформулирована модель столкновительно-излучательного равновесия, связывающая электронные состояния в атомах и ионах, а также скорости столкновительных и радиационных процессов с населённостями этих состояний. Пространство состояний рассчитывается в рамках модели Хартри-Фока-Слэтера для изолированного иона. Список конфигураций формируется в зависимости от постановки задачи. Исходя из поставленной в исследовании задачи, в набор состояний могут быть добавлены конфигурации, учитывающие многоэлектронные возбуждения и возбуждения с внутренних оболочек. Для уточнения энергий конфигураций, положений спектральных линий и сил осцилляторов могут использоваться как сторонние программы атомной физики, так и экспериментальные данные.

Скорости элементарных процессов рассчитываются по формулам Режемортера [100, 101] и Лотца [102] для скоростей столкновительных процессов возбуждения и ионизации соответственно. Для скоростей радиационных процессов используются формулы из [103, 104], в том числе формула Крамерса [105] для скорости фотоионизации. Скорость процесса автоионизации рассчитывается в дипольном приближении [106]. Скорости обратных процессов вычисляются на основе принципа детального равновесия [107]. Для расчёта профиля спектральной линии используется профиль Фойгта [109].

Наличие в плазме даже относительно малой концентрации горячих электронов может приводить к заметному изменению ионизационного состава плазмы, поэтому в предлагаемой модели предусмотрена возможность учёта фиксированной доли горячих электронов с температурой много больше температуры окружающей плазмы [112], при этом функция распределения свободных электронов по энергиям предполагается максвелловской.

Так как СИМ строится на основе базы атомных данных, полученной для изолированных ионов, то для устранения нефизичного поведения среднего заряда и спектра поглощения/излучения при высоких плотностях были применены модели Стюарта-Пьятта [110] и Экера-Кролла [111] с целью снижения потенциалов ионизации.

Решение системы кинетических уравнений осуществляется с помощью прямого метода Гаусса с выделением главного элемента по столбцу [129].

Представленная в этой главе модель реализована на языке программирования FORTRAN в виде отдельной программы THERMOS_CRE [86], которая вошла в состав вычислительного комплекса THERMOS [85].

Разработанная программа рекомендуется к применению для производства широкодиапазонных таблиц по радиационным и термодинамическим свойствам плазмы с произвольным полем излучения. Для ускорения расчёта таблиц реализован параллельный запуск задач на ЭВМ для фиксированных точек по температуре и плотности с помощью отдельных MPI-процессов.

В настоящее время таблицы, полученные по разработанной программе THERMOS_CRE, активно используются при решении практических задач радиационной газовой динамики и физики плазмы [66, 68, 136, 137].

Глава 2

Согласованные решения уравнения переноса излучения в одномерной геометрии с кинетической системой

Сравнение результатов моделирования плазмы с экспериментально измеренными данными достаточно сложная задача, так как создать в лабораторных условиях однородную по времени и пространству плазму не представляется возможным. В общем случае для моделирования динамики плазмы требуется полноценное трёхмерное моделирование с помощью сложных кодов радиационной газовой динамики (РГД). При этом уравнение переноса излучения необходимо решать согласованно с кинетической системой, так как населённости основных и возбуждённых состояний ионов зависят от интенсивности излучения через скорости радиационных процессов, а интенсивность излучения определяется коэффициентами поглощения и излучательной способностью, которые, в свою очередь, зависят от населённостей. В такой постановке задачу моделирования решить сложно, даже с учётом существующих мощностей суперЭВМ. Поэтому в РГД-кодах используются разные приближения: одни – для решения уравнения переноса излучения, другие – для коэффициентов поглощения и излучательной способности [66, 134, 135, 68, 136, 137].

С другой стороны, получаемые в экспериментах устойчивые плазменные образования часто могут быть описаны с помощью одномерной структуры: шар, цилиндр или тонкая пленка [138, 139]. В этом случае задача согласованного решения уравнения переноса излучения с кинетической системой в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия может быть решена.

В данной главе рассмотрены согласованные решения уравнения переноса излучения с кинетической системой в приближении стокновительно-излучательного равновесия, сформулированного в 1 главе, для ряда одномерных модельных систем различного типа симметрии – плоской, цилиндрической и сферической.

2.1. Уравнение переноса излучения

Запишем уравнение переноса излучения для излучающей и поглощающей среды, характеризуемой спектральными коэффициентами излучения j_ω и поглощения κ_ω . Тогда излучение, распространяющееся в этой среде с интенсивностью $I_\omega(s, \mathbf{\Omega}, t)$ в направлении $\mathbf{\Omega}$ вдоль луча s , будет удовлетворять уравнению:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{\Omega} I_\omega) = j_\omega - \kappa_\omega I_\omega, \quad (2.1)$$

где c – скорость света в вакууме. В большинстве практических приложений членом $\frac{1}{c} \frac{\partial I_\omega(\mathbf{\Omega})}{\partial t}$ в уравнении (2.1) можно пренебречь по сравнению с другими членами. Если направление $\mathbf{\Omega}$ выбрано вдоль луча s , то $\nabla \cdot (\mathbf{\Omega} I_\omega) = \frac{\partial I_\omega}{\partial s}$, где $\frac{\partial}{\partial s}$ означает дифференцирование вдоль луча s . Тогда уравнение (2.1) можно переписать в виде:

$$\frac{dI_\omega}{ds} = j_\omega - \kappa_\omega I_\omega. \quad (2.2)$$

Уравнение (2.2) является интегродифференциальным уравнением в частных производных, поскольку производная $\frac{d}{ds}$ содержит частные производные по пространственным координатам, если переписать её в явном виде для выбранной системы координат.

Произведём формальное интегрирование уравнения (2.2) вдоль луча s в направлении $\mathbf{\Omega}$ для граничного условия [140]:

$$I_\omega(s = s_0, \mathbf{\Omega}) = I_{\omega 0}.$$

На рисунке 2.1 схематически изображены координаты, используемые при формальном интегрировании уравнения переноса излучения. Запишем решение уравнения (2.2) для интенсивности излучения в интегральной форме

$$I_{\omega}(s) = I_{\omega 0} \exp \left[- \int_{s_0}^s \kappa_{\omega} ds' \right] + \int_{s_0}^s \kappa_{\omega} S_{\omega} \exp \left[- \int_{s'}^s \kappa_{\omega} ds'' \right] ds',$$

где $S_{\omega}(s) = \frac{j_{\omega}(s)}{\kappa_{\omega}(s)}$ – функция источников вдоль луча s .

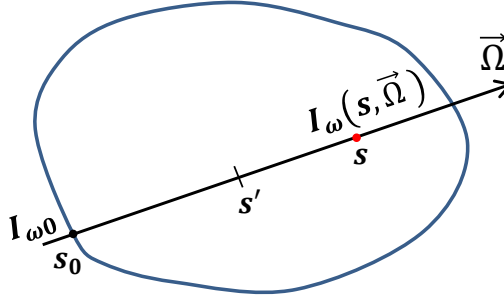


Рис. 2.1. Схематическое изображение рассматриваемой задачи

2.2. Решение для плоскопараллельной геометрии

Так как решение уравнения переноса для общего трехмерного случая представляет собой очень сложную задачу, в большинстве практических случаев рассматривается одномерная задача. Рассмотрим среду, состоящую из плоских слоёв, перпендикулярных оси $0z$, причём в каждом слое радиационные свойства постоянны. Пусть s – длина, измеренная вдоль произвольного направления $\mathbf{\Omega}$, а θ – полярный угол между направлением $\mathbf{\Omega}$ и положительным направлением оси $0z$ (см. рисунок 2.2). Производная по направлению $\frac{d}{ds}$ может быть выражена через производные по пространственной координате z в виде:

$$\frac{d}{ds} = \frac{\partial}{\partial z} \frac{dz}{ds} = \mu \frac{\partial}{\partial z},$$

где $\mu = \cos \theta$ – косинус угла θ между направлением распространения излучения Ω и осью $0z$, а частные производные по x и y для плоскопараллельного случая равны нулю. Уравнение переноса излучения (2.2) для плоского бесконечного слоя принимает следующий вид:

$$\mu \frac{dI_\omega(z, \theta)}{dz} = j_\omega - \kappa_\omega I_\omega(z, \theta). \quad (2.3)$$

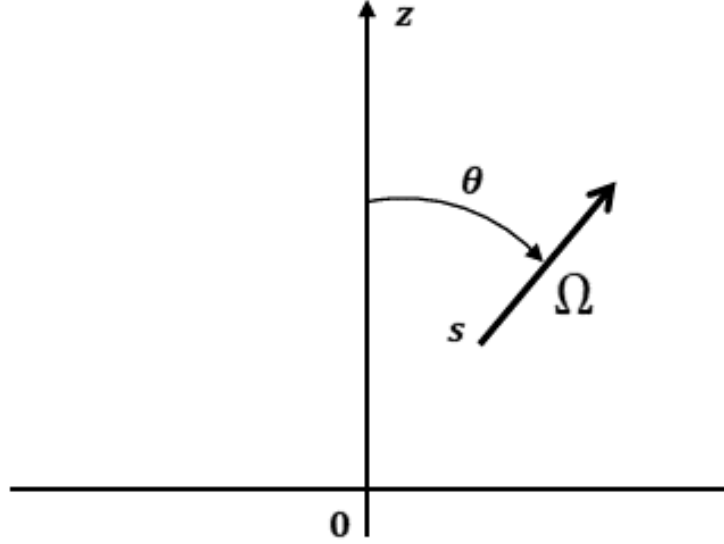


Рис. 2.2. Система координат для плоского слоя

2.2.1. Решение для однородного плоского слоя

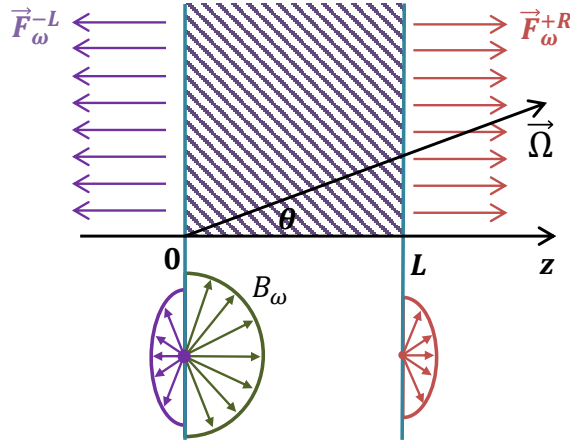
Найдём решение уравнения переноса излучения для однородного плоского слоя, где коэффициент поглощения κ_ω и излучательная способность j_ω постоянны по z (см. рисунок 2.3).

Решение однородного уравнения

$$\mu \frac{dI_\omega(z, \theta)}{dz} + \kappa_\omega I_\omega(z, \theta) = 0$$

имеет вид $I_\omega(z, \mu) = C \exp\left(-\frac{\kappa_\omega z}{\mu}\right)$. Подставим эту формулу в (2.3) и определим коэффициент C :

$$C = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[\exp\left(\frac{\kappa_\omega z}{\mu}\right) + A \right].$$

Рис. 2.3. Плоский слой плазмы толщиной L

Получаем решение уравнения переноса (2.3):

$$I_{\omega}(z, \mu) = \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 + A \exp \left(-\frac{\kappa_{\omega} z}{\mu} \right) \right],$$

где коэффициент A определяется в зависимости от граничных условий.

Если слева присутствует планковский источник излучения с интенсивностью

$$B_{\omega}(K, T_{rad}) = K \frac{15}{\pi^5} \sigma \frac{\omega^3}{\exp(\omega/T_{rad}) - 1}, \quad (2.4)$$

где K – коэффициент ослабления, T_{rad} – температура излучения. Коэффициент ослабления полагается равным единице, если это не оговорено отдельно.

Тогда граничное условие на левой границе плоского слоя ($z = 0$) может быть записано в виде:

$$I_{\omega}(z = 0, \mu > 0) = B_{\omega},$$

то мы получим, что коэффициент $A = -1 + \frac{\kappa_{\omega}}{j_{\omega}} B_{\omega}$.

В итоге решение уравнения переноса излучения (2.3) для однородного плоского слоя с внешним планковским источником излучения может быть представлено в виде:

$$I_{\omega}(z = L, \mu > 0) = \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau}{\mu} \right) \right] + B_{\omega} \exp \left(-\frac{\tau}{\mu} \right),$$

где $\tau = \kappa_\omega L$ – оптическая толщина слоя.

Запишем выражение для определения спектрального потока энергии излучения:

$$\mathbf{F}_\omega = \int I_\omega \mathbf{\Omega} d\Omega, \quad (2.5)$$

где $d\Omega$ – элемент телесного угла.

Найдём проекцию векторной величины F_ω на ось $0z$ для однородного слоя толщиной L :

$$\begin{aligned} F_{\omega z}(z = L, \mu > 0) &= \int_0^{\pi/2} I_\omega \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\ &= 2\pi \int_0^{\pi/2} \left\{ \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{\cos \theta}\right) \right] + B_\omega \exp\left(-\frac{\tau}{\cos \theta}\right) \right\} \cos \theta \sin \theta d\theta = \\ &= \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} [1 - 2E_3(\tau)] + 2\pi B_\omega E_3(\tau) = \\ &= \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} [1 - e^{-\tau} + \tau e^{-\tau} - \tau^2 E_1(\tau)] + \pi B_\omega [e^{-\tau} - \tau e^{-\tau} + \tau^2 E_1(\tau)]. \end{aligned} \quad (2.6)$$

При выводе использовались определение и рекуррентное соотношение для интегральной экспоненты:

$$E_n(x) = \int_1^\infty t^{-n} e^{-xt} dt, \quad nE_{n+1}(x) = e^{-x} - xE_n(x). \quad (2.7)$$

Запишем выражение для определения спектральной плотности энергии излучения:

$$U_\omega = \frac{1}{c} \int I_\omega d\Omega. \quad (2.8)$$

Найдём спектральную плотность энергии излучения в центре однородного слоя толщиной L :

$$\begin{aligned} U_\omega &= \frac{2\pi}{c} \int_0^{\pi/2} (I_\omega^{+R} + I_\omega^{-L}) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{2\pi}{c} \int_0^{\pi/2} \left\{ 2 \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau/2}{\cos \theta}\right) \right] + B_\omega \exp\left(-\frac{\tau/2}{\cos \theta}\right) \right\} \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{4\pi}{c} \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} [1 - E_2(\tau/2)] + \frac{2\pi}{c} B_\omega E_2(\tau/2) = \\ &= \frac{4\pi}{c} \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[1 - e^{-\tau/2} + \frac{\tau}{2} E_1(\tau/2) \right] + \frac{2\pi}{c} B_\omega \left[e^{-\tau/2} - \frac{\tau}{2} E_1(\tau/2) \right], \end{aligned}$$

где I_{ω}^{+R} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими слева от центра слоя, а I_{ω}^{-L} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими справа от центра слоя.

2.2.2. Решение для неоднородного плоского слоя

Пусть задан плоский слой плазмы толщиной L , состоящий из N -подслоёв $[z_{i-1}, z_i]$, $i = 1 \dots N$, $z_0 = 0$, каждый из которых имеет заданную температуру T_i и плотность вещества ρ_i . В данном разделе для сокращения записи спектральных величин в формулах опустим символ ω (энергия фотонов). В каждом из слоёв коэффициенты излучения j_i и поглощения κ_i будем считать постоянными. Введём определение функции источника для i -го слоя в виде:

$$S_i = \frac{j_i}{\kappa_i}$$

и оптическую толщину:

$$\tau_i = \kappa_i(z_i - z_{i-1}).$$

Рассмотрим решение уравнения переноса на примере слоя, состоящего из 3-х однородных подслоёв (см. рисунок 2.4).

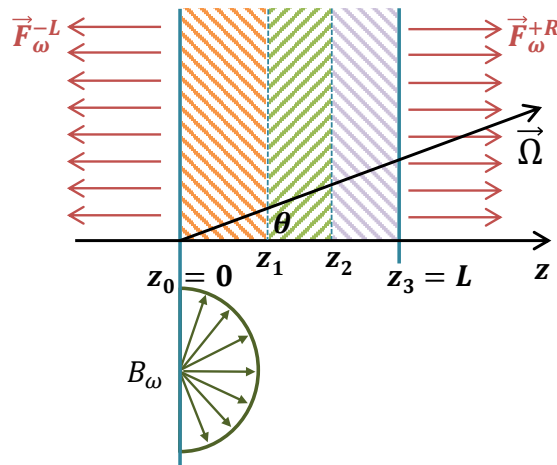


Рис. 2.4. Плоский слой плазмы толщиной L , состоящий из 3-х подслоёв

Рассмотрим 1-й слой ($z_0 < z < z_1$) и поставим граничное условие для левой границы слоя в виде:

$$I_1(z = z_0, \mu > 0) = B_\omega.$$

Решение уравнения переноса излучения в 1-м слое будем искать в виде:

$$I_1(z, \mu) = S_1 \left[1 + A_1 \exp \left(-\frac{\kappa_1 z}{\mu} \right) \right].$$

При условии планковского источника излучения, падающего на левую границу слоя, определим коэффициент:

$$A_1 = \exp \left(\frac{\kappa_1 z_0}{\mu} \right) \left[\frac{B}{S_1} - 1 \right].$$

Запишем выражение для определения спектральной интенсивности энергии излучения в центре 1-го слоя, при этом направление совпадает с осью Oz :

$$I_1 \left(z = \frac{z_0 + z_1}{2}, \mu > 0 \right) = S_1 \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_1/2}{\mu} \right) \right] + B \exp \left(-\frac{\tau_1/2}{\mu} \right).$$

Рассмотрим 2-й слой ($z_1 < z < z_2$). Для него граничным условием на левой его границе будет внешнее излучение, производимое 1-м слоем. Решение уравнения переноса излучения во 2-ом слое будем искать в виде:

$$I_2(z, \mu) = S_2 \left[1 + A_2 \exp \left(-\frac{\kappa_2 z}{\mu} \right) \right].$$

Тогда, исходя из граничного условия

$$I_2(z = z_1, \mu > 0) = I_1(z = z_1, \mu > 0) = S_1 \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_1}{\mu} \right) \right] + B \exp \left(-\frac{\tau_1}{\mu} \right),$$

определим коэффициент:

$$A_2 = \exp \left(\frac{\kappa_2 z_1}{\mu} \right) \left\{ \frac{S_1}{S_2} \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_1}{\mu} \right) \right] + \frac{B}{S_2} \exp \left(-\frac{\tau_1}{\mu} \right) - 1 \right\}.$$

Решение в центре 2-го слоя ($\mu > 0$) примет вид:

$$I_2 \left(z = \frac{z_1 + z_2}{2}, \mu > 0 \right) = S_2 \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_2/2}{\mu} \right) \right] + \\ + S_1 \left[\exp \left(-\frac{\tau_2/2}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2/2}{\mu} \right) \right] + \\ + B \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2/2}{\mu} \right).$$

Рассмотрим 3-й слой ($z_2 < z < z_3$). Для него граничным условием на левой его границе будет внешнее излучение, производимое 1-ым и 2-ым слоями.

Решение уравнения переноса излучения в 3-м слое будем искать в виде:

$$I_3(z, \mu) = S_3 \left[1 + A_3 \exp \left(-\frac{\kappa_3 z}{\mu} \right) \right].$$

Тогда, исходя из граничного условия

$$I_3(z = z_2, \mu > 0) = I_2(z = z_2, \mu > 0) = S_2 \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_2}{\mu} \right) \right] + \\ + S_1 \left[\exp \left(-\frac{\tau_2}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2}{\mu} \right) \right] + \\ + B \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2}{\mu} \right),$$

определим коэффициент:

$$A_3 = \exp \left(\frac{\kappa_3 z_2}{\mu} \right) \left\{ \frac{S_2}{S_3} \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_2}{\mu} \right) \right] + \right. \\ + \frac{S_1}{S_3} \left[\exp \left(-\frac{\tau_2}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2}{\mu} \right) \right] + \\ \left. + \frac{B}{S_3} \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2}{\mu} \right) - 1 \right\}.$$

Решение в центре 3-го слоя ($\mu > 0$) примет вид:

$$I_3 \left(z = \frac{z_2 + z_3}{2}, \mu > 0 \right) = S_3 \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_3/2}{\mu} \right) \right] + \\ + S_2 \left[\exp \left(-\frac{\tau_3/2}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\tau_2 + \tau_3/2}{\mu} \right) \right] + \\ + S_1 \left[\exp \left(-\frac{\tau_2 + \tau_3/2}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2 + \tau_3/2}{\mu} \right) \right] + \\ + B \exp \left(-\frac{\tau_1 + \tau_2 + \tau_3/2}{\mu} \right).$$

Обобщим на случай слоя, состоящего из N -подслоёв. Спектральную интенсивность энергии излучения в центре i -го слоя можно представить в виде:

$$I_i = \begin{cases} I_i^{+R}, & \text{если } \mu > 0, \\ I_i^{-L}, & \text{если } \mu < 0, \end{cases}$$

где I_i^{+R} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими от слоёв, расположенных слева от центра i -го слоя, I_i^{-L} – спектральная интенсивность энергии излучения, определяемая фотонами, пришедшими от слоёв, расположенных справа от центра i -го слоя:

$$\begin{aligned} I_i^{+R} &= S_i \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_i/2}{\mu} \right) \right] + \\ &+ \sum_{j=1}^{i-1} S_j \left[\exp \left(-\frac{\sum_{j'=j+1}^i \tau_{j'}}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\sum_{j'=j}^i \tau_{j'}}{\mu} \right) \right] + \\ &+ B \exp \left(-\frac{\sum_{j'=1}^i \tau_{j'}}{\mu} \right), \\ I_i^{-L} &= S_i \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_i/2}{\mu} \right) \right] + \\ &+ \sum_{j=i+1}^N S_j \left[\exp \left(-\frac{\sum_{j'=i}^{j-1} \tau_{j'}}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\sum_{j'=i}^j \tau_{j'}}{\mu} \right) \right], \end{aligned}$$

если $j' = i$, то $\tau^{j'}|_{j'=i} = \tau_i/2$.

Выпишем выражение для определения проекции спектрального потока энергии излучения, выходящего с левой поверхности слоя ($z = z_0 = 0$):

$$\begin{aligned} F_z^{-L}(z = z_0, \mu < 0) &= \int_0^{\pi/2} \left(I_1^{-L}(z = z_0) \right) \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\ &= 2\pi S_1 \int_0^1 \left[1 - \exp \left(-\frac{\tau_1}{\mu} \right) \right] \mu d\mu + \\ &+ 2\pi \sum_{j=2}^N S_j \int_0^1 \left[\exp \left(-\frac{\sum_{j'=1}^{j-1} \tau_{j'}}{\mu} \right) - \exp \left(-\frac{\sum_{j'=1}^j \tau_{j'}}{\mu} \right) \right] \mu d\mu. \end{aligned}$$

Аналогичным образом определим проекцию спектрального потока энергии

излучения, выходящего с правой поверхности слоя ($z = z_N = L$):

$$\begin{aligned}
F_z^{+R}(z = z_N, \mu > 0) &= \int_0^{\pi/2} \left(I_N^{+R}(z_N = L) \right) \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \\
&= 2\pi S_N \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_N}{\mu}\right) \right] \mu d\mu + \\
&+ 2\pi \sum_{j=1}^{N-1} S_j \int_0^1 \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=j+1}^N \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=j}^N \tau_{j'}}{\mu}\right) \right] \mu d\mu + \\
&+ 2\pi B \int_0^1 \exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^N \tau_{j'}}{\mu}\right) \mu d\mu.
\end{aligned}$$

Введём обозначения:

$$\zeta_j^L = \sum_{j'=1}^j \tau_{j'}, \quad \zeta_j^R = \sum_{j'=j}^N \tau_{j'}, \quad (2.9)$$

и воспользуемся рекуррентным соотношением для интегральной экспоненты (2.7), тогда можно записать:

$$\begin{aligned}
F_z^{-L} &= \pi S_1 [1 - 2E_3(\tau_1)] + \pi \sum_{j=2}^N S_j \left[2E_3(\zeta_{j-1}^L) - 2E_3(\zeta_j^L) \right] = \\
&= \pi S_1 [1 - e^{-\tau_1} + \tau_1 e^{-\tau_1} - \tau_1^2 E_1(\tau_1)] + \\
&+ \pi \sum_{j=2}^N S_j \left\{ e^{-\zeta_{j-1}^L} - \zeta_{j-1}^L e^{-\zeta_{j-1}^L} + (\zeta_{j-1}^L)^2 E_1(\zeta_{j-1}^L) - \right. \\
&\left. - \left[e^{-\zeta_j^L} - \zeta_j^L e^{-\zeta_j^L} + (\zeta_j^L)^2 E_1(\zeta_j^L) \right] \right\}, \\
F_z^{+R} &= \pi S_N [1 - 2E_3(\tau_N)] + \pi \sum_{j=1}^{N-1} S_j \left[2E_3(\zeta_{j+1}^R) - 2E_3(\zeta_j^R) \right] + \\
&+ \pi B [2E_3(\zeta_1^R)] = \\
&= \pi S_N [1 - e^{-\tau_N} + \tau_N e^{-\tau_N} - \tau_N^2 E_1(\tau_N)] + \\
&+ \pi \sum_{j=1}^{N-1} S_j \left\{ e^{-\zeta_{j+1}^R} - \zeta_{j+1}^R e^{-\zeta_{j+1}^R} + (\zeta_{j+1}^R)^2 E_1(\zeta_{j+1}^R) - \right. \\
&\left. - \left[e^{-\zeta_j^R} - \zeta_j^R e^{-\zeta_j^R} + (\zeta_j^R)^2 E_1(\zeta_j^R) \right] \right\} + \\
&+ \pi B \left[e^{-\zeta_1^R} - \zeta_1^R e^{-\zeta_1^R} + (\zeta_1^R)^2 E_1(\zeta_1^R) \right].
\end{aligned}$$

Для вычисления спектральных коэффициентов внутри слоя необходимо знать спектральную плотность энергии излучения в этом слое. Спектральную плотность энергии излучения будем вычислять в центрах слоёв, тогда для i -го слоя имеем

$$U_i = U_i^{+R} + U_i^{-L},$$

где U_i^{+R} – вклад в плотность энергии за счёт фотонов с $\mu > 0$, U_i^{-L} – вклад в плотность энергии за счёт фотонов с $\mu < 0$:

$$\begin{aligned} U_i^{+R} = & \frac{2\pi}{c} S_i \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_i/2}{\mu}\right) \right] d\mu + \\ & + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=1}^{i-1} S_j \int_0^1 \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=j+1}^i \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=j}^i \tau_{j'}}{\mu}\right) \right] d\mu + \\ & + \frac{2\pi}{c} B \int_0^1 \exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^i \tau_{j'}}{\mu}\right) d\mu, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U_i^{-L} = & \frac{2\pi}{c} S_i \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_i/2}{\mu}\right) \right] d\mu + \\ & + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=i+1}^N S_j \int_0^1 \left[\exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^{j-1} \tau_{j'}}{\mu}\right) - \exp\left(-\frac{\sum_{j'=1}^j \tau_{j'}}{\mu}\right) \right] d\mu, \end{aligned}$$

если $j' = i$, то $\tau^{j'}|_{j'=i} = \tau_i/2$.

Воспользуемся обозначением (2.9) и рекуррентным соотношением для интегральной экспоненты (2.7), тогда получаем:

$$\begin{aligned} U_i^{+R} = & \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - E_2\left(\frac{\tau_i}{2}\right) \right] + \\ & + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=1}^{i-1} S_j \left[E_2\left(\zeta_{j+1}^R\right) - E_2\left(\zeta_j^R\right) \right] + \frac{2\pi}{c} B E_2\left(\zeta_1^R\right) = \\ = & \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau_i}{2}\right) + \frac{\tau_i}{2} E_1\left(\frac{\tau_i}{2}\right) \right] + \\ & + \frac{2\pi}{c} \sum_{j=1}^{i-1} S_j \left\{ \exp\left(-\zeta_{j+1}^R\right) - \zeta_{j+1}^R E_1\left(\zeta_{j+1}^R\right) - \right. \\ & \left. - \left[\exp\left(-\zeta_j^R\right) - \zeta_j^R E_1\left(\zeta_j^R\right) \right] \right\} + \\ & + \frac{2\pi}{c} B \left[\exp\left(-\zeta_1^R\right) - \zeta_1^R E_1\left(\zeta_1^R\right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_i^{-L} &= \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - E_2 \left(\frac{\tau_i}{2} \right) \right] + \\
&+ \frac{2\pi}{c} \sum_{j=i+1}^N S_j \left[E_2 \left(\zeta_{j-1}^L \right) - E_2 \left(\zeta_j^L \right) \right] = \\
&= \frac{2\pi}{c} S_i \left[1 - \exp \left(\frac{-\tau_i}{2} \right) + \frac{\tau_i}{2} E_1 \left(\frac{\tau_i}{2} \right) \right] + \\
&+ \frac{2\pi}{c} \sum_{j=i+1}^N S_j \left\{ \exp \left(-\zeta_{j-1}^L \right) - \zeta_{j-1}^L E_1 \left(\zeta_{j-1}^L \right) - \right. \\
&\left. - \left[\exp \left(-\zeta_j^L \right) - \zeta_j^L E_1 \left(\zeta_j^L \right) \right] \right\},
\end{aligned}$$

где дополнительно отметим, что в ζ^L и ζ^R при $j' = i$ используется $\tau^{j'}|_{j'=i} = \tau_i/2$.

2.3. Решение для сферической геометрии

2.3.1. Однородный сферический источник

Рассмотрим интеграл уравнения переноса излучения (2.2), вычисленный вдоль хорды внутри сферического однородного источника плазмы, что приводит к следующему решению для интенсивности энергии излучения I_ω :

$$I_\omega = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} [1 - \exp(-\kappa_\omega L(y))],$$

где $L(y)$ – длина хорды, а y – координата, характеризующая хорду внутри источника. Если разместить ось z вдоль направления прямой наблюдения, а y использовать в качестве прицельного параметра, то проекция спектрального потока энергии излучения на ось z можно записать в виде:

$$F_\omega = \int_0^R I_\omega(y) 2\pi y dy,$$

где R – радиус сферы. Этот интеграл может быть вычислен аналитически, так как предполагается, что источник является однородным:

$$F_\omega = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left(1 + \frac{e^{-2\kappa_\omega R}}{\kappa_\omega R} - \frac{(1 - e^{-2\kappa_\omega R})}{2(\kappa_\omega R)^2} \right). \quad (2.10)$$

Введём обозначение для оптической толщины через $\tau_\omega = \kappa_\omega R$, тогда выражение (2.10) примет вид:

$$F_\omega = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left(1 + \frac{e^{-2\tau_\omega}}{\tau_\omega} - \frac{(1 - e^{-2\tau_\omega})}{2\tau_\omega^2} \right). \quad (2.11)$$

Проекция спектрального потока энергии излучения (2.11) в случае малых оптических толщин $\tau_\omega \ll 1$ имеет предел:

$$F_\omega \rightarrow \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left(\frac{4}{3}\tau_\omega - \tau_\omega^2 \right) \rightarrow \frac{4\pi}{3} R j_\omega, \quad (2.12)$$

а при больших оптических толщинах $\tau_\omega \gg 1$:

$$F_\omega \rightarrow \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left(1 - \frac{1}{2\tau_\omega^2} \right) \rightarrow \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}. \quad (2.13)$$

2.3.2. Неоднородный сферический слой

Решение для слоя будем искать методом непосредственного численного интегрирования [141] уравнения (2.2). Чтобы найти интенсивность энергии излучения в заданной точке расчётной области, проведём через эту точку лучи в различных направлениях. Для каждого из лучей будем использовать формальное решение уравнения переноса при отсутствии внешних источников излучения

$$I_\omega(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_0^{s_{\max}} \kappa_\omega(s) S_\omega(s) e^{-\tau(s)} ds, \quad (2.14)$$

$$\tau(s) = \int_0^s \kappa_\omega(s') ds'. \quad (2.15)$$

Здесь s – расстояние, отсчитываемое вдоль луча интегрирования в сторону, противоположную направлению распространения фотонов $\mathbf{\Omega}$, так что $s = 0$ соответствует радиус-вектору $\mathbf{r}$, а $s_{\max}$ – пересечению луча с границей излучающего тела.

Это формальное решение, выраженное в интегральном виде, является точным решением уравнения переноса вдоль луча при отсутствии рассеяния.

Выбор пространственных направлений, в которых испускаются лучи, должен производиться с учётом решаемой задачи и особенностей интегрирования на оптически толстых расчётных интервалах. При увеличении числа лучей, испускаемых из каждой расчётной точки, решение должно сходиться к точному значению интеграла по угловым переменным. Данный метод получил название метода дискретных направлений.

Рассмотрим неоднородный слой радиуса R , обладающий сферической симметрией. Так как коэффициент поглощения κ и функция источника S зависят только от модуля радиус-вектора, то формулы (2.14) – (2.15) можно переписать в виде:

$$I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_0^{s_{\max}} \kappa(r') S(r') e^{-\tau(s)} ds, \quad (2.16)$$

$$\tau(s) = \int_0^s \kappa(r'') ds'. \quad (2.17)$$

Здесь и далее для сокращения записи спектральных величин в формулах опустим символ ω (энергия фотонов).

Чтобы упростить геометрические построения, введём систему координат особым образом. Пусть плоскость Oxy проходит через векторы $\mathbf{r}$ и $\mathbf{\Omega}$, при этом направление оси Oy совпадает с направлением радиус-вектора $\mathbf{r}$ (см. рисунок 2.5).

Тогда координаты x и y связаны с переменной s соотношениями:

$$x = -s \sin \varphi, \quad y = r - s \cos \varphi.$$

Обозначим $\mu = \cos \varphi$, тогда:

$$r'(s) = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{s^2 + r^2 - 2rs\mu}, \quad (2.18)$$

$$r''(s') = \sqrt{(s')^2 + r^2 - 2rs'\mu}. \quad (2.19)$$

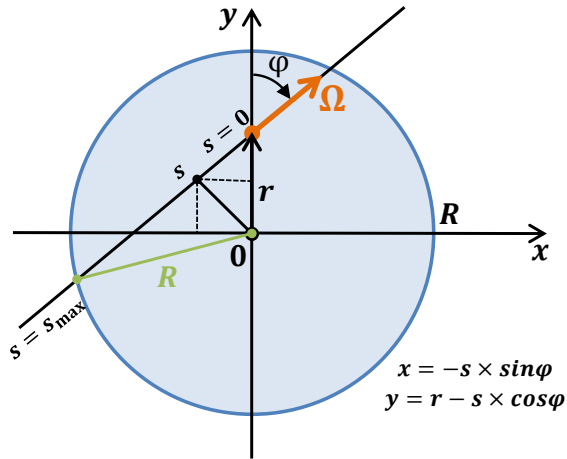


Рис. 2.5. Система координат

Верхний предел интегрирования $s_{\max}$ определяется из условия $r' = R$:

$$s_{\max} = r\mu + \sqrt{R^2 - r^2(1 - \mu^2)}. \quad (2.20)$$

Выражения (2.16), (2.17) и (2.18) – (2.20) полностью определяют решение уравнения переноса излучения (2.2) и справедливы на всём интервале значений $\varphi = [0, \pi]$ ($\mu = [-1, 1]$).

Будем искать решение для слоя плазмы со сферической симметрией, состоящего из N_r -подслоёв $[r_{i-1}, r_i]$, $i = 1 \dots N_r$, $r_0 = 0$, каждый из которых имеет заданную температуру электронов T_i и плотность вещества ρ_i . В каждом из подслоёв будем считать постоянными коэффициент поглощения κ_i и излучательную способность j_i .

Луч, вдоль которого проводится интегрирование, пересекает границы слоёв в точках:

$$s_j = r\mu \pm \sqrt{r_i^2 - r^2(1 - \mu^2)}.$$

Для каждой границы пересечения луча с i -м слоем должно выполняться условие:

$$0 \leq s_j \leq s_{\max},$$

отсюда определяется общее количество пересечений N_s . Полученные значения s_j сортируются в порядке возрастания.

Интегралы в выражениях (2.16) и (2.17) могут быть представлены в виде суммы по интервалам $[s_{j-1}, s_j]$, $j = 1 \dots N_s$, $s_0 = 0$, $\tau_0 = 0$, тогда получим:

$$I_{j-1}(r, \varphi) = \int_0^{s_{j-1}} \kappa(r') S(r') e^{-\tau(s)} ds,$$

$$\tau_{j-1} = \int_0^{s_{j-1}} \kappa(r'') ds' = \sum_{m=1}^{j-1} \kappa_m (s_m - s_{m-1}).$$

На интервале $s_{j-1} \leq s \leq s_j$ имеем:

$$\begin{aligned} \tau(s) &= \tau_{j-1} + \kappa_j (s - s_{j-1}), \\ I_j(r, \varphi) &= I_{j-1}(r, \varphi) + \kappa_j S_j e^{-\tau_{j-1}} \int_{s_{j-1}}^{s_j} e^{-\kappa_j (s - s_{j-1})} = \\ &= I_{j-1}(r, \varphi) + S_j e^{-\tau_{j-1}} (1 - e^{-\kappa_j (s_j - s_{j-1})}). \end{aligned}$$

Спектральная интенсивность энергии излучения на границе i -го слоя записывается в виде:

$$I(r = r_i, \varphi) = \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(- \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta \tau_{j'} \right) [1 - e^{-\Delta \tau_j}],$$

$$\Delta \tau_j = \kappa_j (s_j - s_{j-1}), \quad \Delta \tau_0 = 0.$$

Так как интенсивность энергии излучения зависит от модуля радиус-вектора r и угла φ между радиус-вектором и направлением распространения фотонов Ω (см. рисунок 2.6), разобьём пространство по углу $\varphi = [0, \pi]$ на N_φ -секторов $[\varphi_{n-1}, \varphi_n]$, $n = 1 \dots N_\varphi$.

Спектральная проекция потока на направление радиус-вектора $\mathbf{r}$ и спектральная плотность энергии излучения определяются из выражений:

$$\begin{aligned} F_r(r) &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\pi I(r, \varphi) \cos \varphi \sin \varphi d\varphi = \\ &= 2\pi \int_{-1}^1 I(r, \mu) \mu d\mu = \\ &= 2\pi \sum_{i=1}^{N_\varphi} \left(\frac{\mu_{i-1}^2 - \mu_i^2}{2} \right) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(- \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta \tau_{j'} \right) [1 - e^{-\Delta \tau_j}], \end{aligned} \tag{2.21}$$

$$\begin{aligned}
U(r) &= \frac{1}{c} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^\pi I(r, \varphi) \sin \varphi d\varphi = \\
&= \frac{2\pi}{c} \int_{-1}^1 I(r, \mu) d\mu = \\
&= \frac{2\pi}{c} \sum_{i=1}^{N_\varphi} (\mu_{i-1} - \mu_i) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(- \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta \tau_{j'} \right) [1 - e^{-\Delta \tau_j}].
\end{aligned}$$

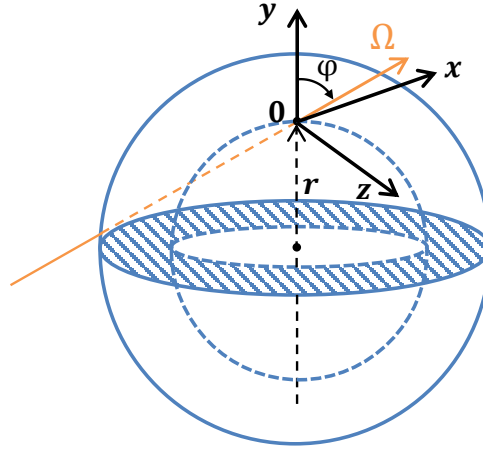


Рис. 2.6. Сферический слой

2.4. Решение для цилиндрической геометрии

2.4.1. Однородный цилиндрический источник

Для практических применений обычно более целесообразно работать со спектральным потоком энергии излучения, так как это наблюдаемая величина, измеряемая детектором:

$$F_\omega = \int I_\omega \cos \alpha d\Omega, \quad (2.22)$$

где $d\Omega$ – элемент телесного угла, α – угол между лучом, соединяющим элемент поверхности и детектор, и вектором нормали соответствующего элемента поверхности (см. рисунок 2.7). Так как детектор находится достаточно далеко от источника излучения, то угол $\alpha \approx 0$ и падающие на детектор лучи можно считать параллельными.

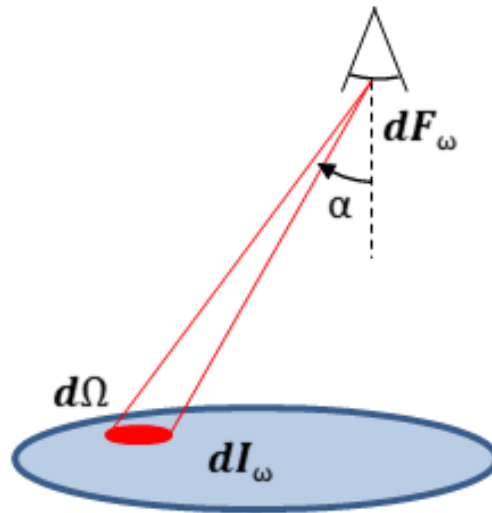


Рис. 2.7. Схематическое определение спектрального потока энергии излучения

Используем симметрию, присущую цилиндрической геометрии, и рассмотрим аксиальный (с торца) и радиальный (с боковой поверхности) потоки. Они соответствуют излучению, покидающему цилиндр нормально и параллельно его основанию.

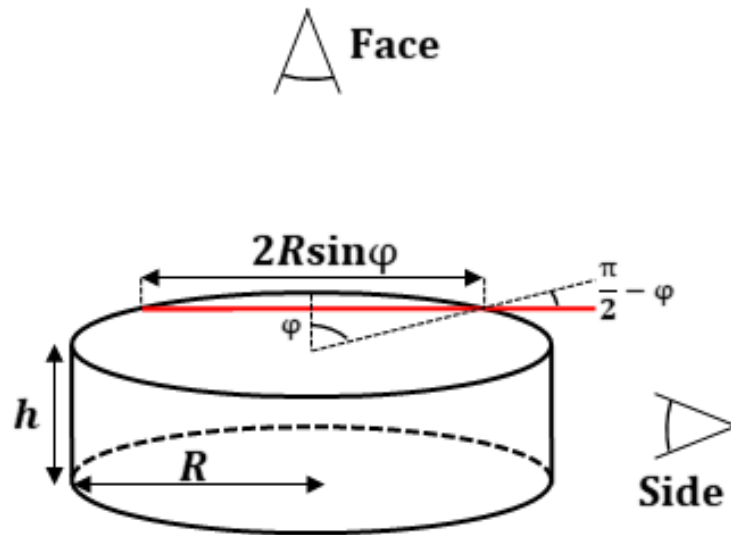


Рис. 2.8. Схема цилиндрической плазмы и детекторов (торцевого и бокового)

Предположим на цилиндрический столб плазмы направлены два детектора, один из которых измеряет аксиальный поток, а второй измеряет ради-

альный поток, как показано на рисунке 2.8. При этом оба детектора находятся достаточно далеко от цели, так что все лучи, достигающие их, параллельны. Детекторы захватывают всю плазму и находятся на одинаковом расстоянии d от цилиндра. При наблюдении потока с торца цилиндрического столба плазмы все фотоны проходят одинаковое расстояние H и движутся перпендикулярно излучающей поверхности. Для излучения, покидающего плазму в аксиальном направлении, можно записать:

$$I_{\omega} = \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} (1 - e^{-\kappa_{\omega} H}),$$

где H – высота цилиндрического столба плазмы. Излучение выходит из плазмы перпендикулярно её поверхности, поэтому после подстановки в формулу (2.22) имеем:

$$F_{\omega}^{\text{Face}} = \frac{\pi R^2}{d^2} \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} (1 - e^{-\kappa_{\omega} H}), \quad (2.23)$$

где R – радиус цилиндра, πR^2 – излучающая поверхность (основание цилиндра), а d – расстояние от детектора до цилиндрического столба плазмы.

При боковом наблюдении лучи охватывают диапазон длин хорд от 0 до $2R$. Если азимутальный угол φ определен, как показано на рисунке 2.8, то фотон проходит расстояние $2R \sin \varphi$ прежде, чем покинуть плазму, и выходит под углом $\pi/2 - \varphi$ относительно вектора нормали к боковой поверхности цилиндра. Следовательно, проекция площади поверхности, видимая детектором, равна $HR \sin \varphi d\varphi$, поэтому поток с боковой поверхности под заданным азимутальным углом составляет:

$$dF_{\omega}^{\text{Side}} = \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} (1 - e^{-2\kappa_{\omega} R \sin \varphi}) \sin \varphi \frac{HR d\varphi}{d^2}.$$

Возьмём интеграл, получим:

$$F_{\omega}^{\text{Side}} = \frac{HR}{d^2} \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \int_0^{\pi} (1 - e^{-2\kappa_{\omega} R \sin \varphi}) \sin \varphi d\varphi.$$

Получившийся интеграл можно взять явным образом, запишем:

$$F_{\omega}^{\text{Side}} = \frac{2HR}{d^2} \frac{j_{\omega}}{\kappa_{\omega}} \left[1 - \frac{\pi}{2} (L_{-1}(2\kappa_{\omega}R) - I_1(2\kappa_{\omega}R)) \right], \quad (2.24)$$

где L_n – модифицированная функция Струве n -го порядка, I_n – модифицированная функция Бесселя n -го порядка первого рода [142]. Важно отметить, что в оптически тонком пределе ($\kappa_{\omega}R \rightarrow 0$) множитель в квадратных скобках в формуле (2.24) сводится к $\left[1 - \exp\left(-\frac{\pi}{2}\kappa_{\omega}R\right) \right]$. Это эквивалентно предположению, что все фотоны проходят среднюю длину пути перед тем, как покинуть плазму (средняя хорда для бокового обзора равна $\pi R/2$).

2.4.2. Неоднородный цилиндрический слой

В случае осевой симметрии интенсивность энергии излучения зависит от модуля радиус-вектора r , а также от направления распространения фотонов Ω . Его можно задать с помощью азимутального угла φ между проекцией Ω на плоскость $0xy$, перпендикулярной оси $0z$, и радиус-вектором $\mathbf{r}$ (лежит в плоскости $0xy$), и с помощью полярного угла θ между Ω и осью $0z$ (см. рисунок 2.9).

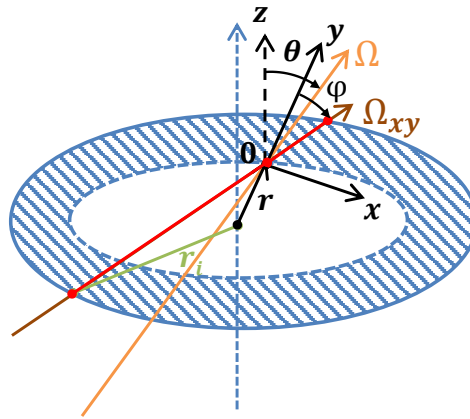


Рис. 2.9. Цилиндрический слой

Спектральная проекция потока на направление радиус-вектора $\mathbf{r}$ и спектральная плотность энергии излучения определяются из выражений:

$$\begin{aligned} F_r(r) &= \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi \int_0^\pi I(r, \varphi, \theta) \sin^2 \theta d\theta = \\ &= 4 \int_0^\pi \cos \varphi d\varphi \int_0^{\pi/2} I(r, \varphi, \theta) \sin^2 \theta d\theta, \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} U(r) &= \frac{1}{c} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi I(r, \varphi, \theta) \sin \theta d\theta = \\ &= \frac{4}{c} \int_0^\pi d\varphi \int_0^{\pi/2} I(r, \varphi, \theta) \sin \theta d\theta. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Здесь учтено, что ввиду симметрии $I(r, \varphi, \pi - \theta) = I(r, -\varphi, \theta) = I(r, \varphi, \theta)$. Так как κ и S не зависят от z , то интегрирование вдоль направления в формулах (2.16) и (2.17) сводится к интегрированию вдоль проекции $\mathbf{\Omega}$ на плоскость $0xy$, которое выполняется аналогично случаю сферической симметрии с единственным отличием – коэффициент поглощения $\kappa(r)$ заменяется на $\kappa(r, \theta) = \frac{\kappa(r)}{\sin \theta}$.

Тогда для спектральной интенсивности энергии излучения на границе i -го слоя имеем:

$$\begin{aligned} I(r = r_i, \varphi, \theta) &= \sum_{j=1}^{N_s} S_j \exp \left(-\frac{1}{\sin \theta} \sum_{j'=0}^{j-1} \Delta \tau_{j'} \right) \left[1 - \exp \left(-\frac{\Delta \tau_j}{\sin \theta} \right) \right]. \\ \Delta \tau_j &= \kappa_j(s_j - s_{j-1}), \quad \Delta \tau_0 = 0. \end{aligned}$$

Произведём замену переменных $t = \sin^{-1} \theta$ и введём обозначение для интеграла

$$A_m(z) = \int_1^\infty \frac{\exp(-zt)}{t^m \sqrt{t^2 - 1}} dt, \quad (2.27)$$

тогда формулы (2.25) и (2.26) примут вид:

$$F_r(r) = 4 \sum_{i=1}^{N_\varphi} (\sin \varphi_i - \sin \varphi_{i-1}) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \left[A_3 \left(\sum_{j'=0}^{j-1} \Delta \tau_{j'} \right) - A_3 \left(\sum_{j'=1}^j \Delta \tau_{j'} \right) \right],$$

$$U(r) = \frac{4}{c} \sum_{i=1}^{N_\varphi} (\varphi_i - \varphi_{i-1}) \sum_{j=1}^{N_s} S_j \left[A_2 \left(\sum_{j'=0}^{j-1} \Delta\tau_{j'} \right) - A_2 \left(\sum_{j'=1}^j \Delta\tau_{j'} \right) \right].$$

Интегралы (2.27) возьмём численно для $m=2,3$. На рисунке 2.10 представлены значения интегралов в зависимости от аргумента z .

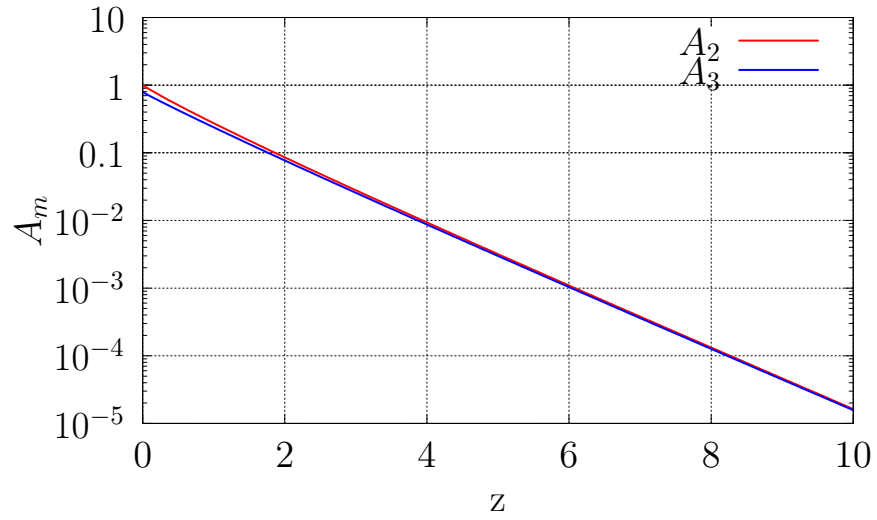


Рис. 2.10. Интегралы $A_m(z)$, $m=2,3$ в зависимости от аргумента z

2.5. Алгоритм согласования

Рассмотрим алгоритм получения согласованного решения стационарной системы кинетических уравнений (СКУ) (1.9) и уравнения переноса излучения (УПИ) (2.2). Пусть задан слой плазмы толщиной R , состоящий из N_r -подслоёв $[r_{i-1}, r_i]$, $i = 1 \dots N_r$, $r_0 = 0$, каждый из которых имеет заданную температуру электронов T_i и плотность вещества ρ_i . На первом шаге для каждого подслоя из решения системы кинетических уравнений (1.9) находятся спектральные коэффициент поглощения κ_i и излучательная способность j_i в приближении прозрачной плазмы ($T_{rad}^{(i)} = 0$) или в приближении ЛТР с планковским полем излучения (2.4) при температуре излучения ($T_{rad}^{(i)} = T_i$). На основе рассчитанных спектральных коэффициентов находится решение уравнения переноса излучения и определяется поле излучения в центре каждого подслоя $U_\omega^{(i)}$. Далее с полученными спектральными распределениями поля излучения в каждом подслое решается система уравнений кинетики, и с помощью итерационного процесса находится согласованное решение. Итерационный процесс продолжается до тех пор, пока не будет достигнута сходимость по величине радиационных потерь с заданной относительной погрешностью $\delta\varepsilon$ ($\delta Q < \delta\varepsilon$, $Q = 4\pi \int j_\omega d\omega$).

На рисунке 2.11 представлена блок-схема алгоритма нахождения согласованного решения стационарной системы кинетических уравнений и уравнения переноса излучения.

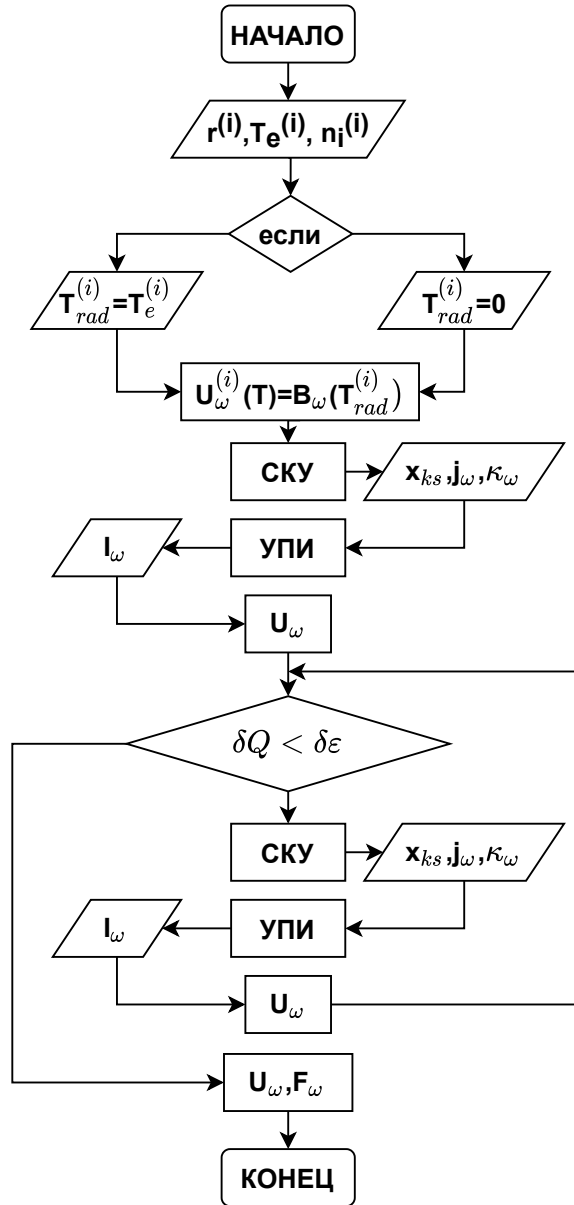


Рис. 2.11. Блок-схема алгоритма нахождения согласованного решения стационарной системы кинетических уравнений и уравнения переноса излучения

2.6. Выводы ко второй главе

В рамках данной главы получены согласованные решения уравнения переноса излучения с системой кинетических уравнений в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия. Решения представлены для трех простейших одномерных геометрий – бесконечный плоский слой, шар и бесконечный цилиндр с неоднородным распределением температуры и плотности.

На основе полученных решений был разработан отдельный программный модуль **THERMOS_Layer** для расчёта свойств плазмы с учётом её размеров, который был встроен в комплекс программ **THERMOS**. Предусмотрено выполнение программы как в последовательном, так и в параллельном режиме с помощью запуска отдельных MPI-процессов для поиска решений системы кинетических уравнений на подслоях и дальнейшего согласования с полем излучения на мастер-процессоре.

Глава 3

Исследования физико-химических свойств высокотемпературной плазмы

В данной главе представлены результаты исследования используемых приближений и моделей, реализованных в рамках усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия для вычисления радиационных и термодинамических свойств высокотемпературной плазмы. Помимо этого рассмотрены результаты сравнительного анализа с экспериментальными данными, аналитическими решениями и с результатами расчётов по независимым программам других авторов.

Уверенность в достоверности получаемых результатов обеспечивается с помощью различных методов верификации разработанных программ и используемых в них моделей и приближений. Одним из способов проверки является сравнение результатов расчётов с экспериментально измеренными данными – например, спектрами пропускания. Другим способом проверки является перекрёстное сравнение разных программ между собой на специально подобранных условиях, при которых бы подчеркивались различные особенности кинетики населённости плазмы.

Представлен сравнительный анализ приближений Стюарта-Пьятта (СП) [110] и Экера-Кролла (ЭК) [111], используемых при учёте плотностных эффектов. Проведена верификация используемых приближений снижения потенциалов ионизации путём сравнения с модифицированной моделью Хартри-Фока-Слэтера для среднего атома, в которой плотностные эффекты учитываются согласованным образом. На примере расчётов для плазмы алюминия и железа представлен сравнительный анализ полученных результатов с ре-

результатами расчётов по независимым программам других авторов [51, 94].

Влияние наличия горячих электронов на ионизационный состав плазмы исследовано на примере плазмы ванадия – для одного из тестовых вариантов, предложенных организаторами семинара по сравнению кодов [143].

Верификация разработанного модуля `THERMOS_Layer`, в котором решение уравнения переноса излучения в одномерной геометрии находится согласованно с решением системы кинетических уравнений в приближении столкновительно-излучательного равновесия, проведена путём сравнения с аналитическими решениями для предельных случаев оптически плотной и прозрачной плазмы. Проведено моделирование спектра прохождения мягкого рентгеновского излучения через слой фотоионизированной кремниевой плазмы и выполнен сравнительный анализ с экспериментальными измерениями [52].

3.1. Эффекты плотности в плазме алюминия и железа

На основе сравнительного анализа проведено исследование моделей СП и ЭК для снижения потенциалов ионизации, и выполнена верификация путем сопоставления с другими моделями, в которых плотностные эффекты учитываются согласованным образом (программы `THERMOS_HFS`, `THERMOS_QZM` [61], `RESEOS` [41]). В дополнение к этому выполнено сопоставление результатов, которые получены с помощью разработанной программы `THERMOS_CRE` с результатами других научных групп в рамках международного семинара по сравнению неравновесных кодов [51].

Влияние учёта эффектов плотности на термодинамические и оптические свойства вещества рассмотрено на примерах расчётов для плазмы алюминия и железа.

3.1.1. Плазма алюминия

При помощи разработанной программы THERMOS_CRE, в которой реализована усовершенствованная модель СИР (см. главу 1), проведём расчёты плазмы алюминия без учёта плотностных эффектов и с их учётом по моделям снижения потенциалов ионизации СП и ЭК. Будем рассматривать плазму, находящуюся в ЛТР. Для её моделирования зададим планковское поле излучения с температурой $T_{rad} = T_e$.

Были проведены расчёты изотерм среднего заряда в плазме алюминия для температуры электронов 10, 30, 100 и 300 эВ и плотностей вещества в диапазоне от 10^{-9} до 10 г/см³. В результате сравнительного анализа результатов, представленных на рисунке 3.1, видно, что повышение плотности приводит к росту среднего заряда иона за счёт использования моделей снижения потенциалов ионизации.

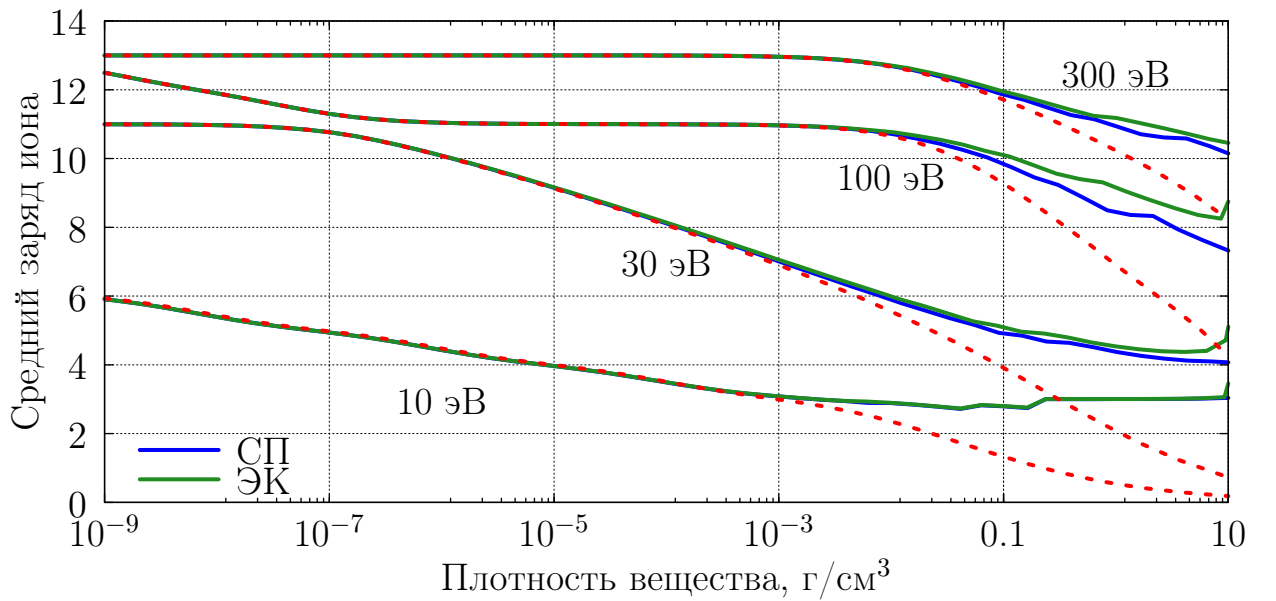


Рис. 3.1. Изотермы среднего заряда в плазме алюминия от 10 до 300 эВ, рассчитанные в приближении ЛТР с помощью программы THERMOS_CRE с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП (синяя кривая), ЭК (зелёная кривая) и без учёта эффектов плотности (красная кривая)

Такое поведение объясняется тем, что с увеличением плотности возрастает взаимодействие между ионами и электронами. Это приводит к изменению атомного потенциала, в котором высоковозбуждённые состояния переходят в непрерывный спектр, а энергия, необходимая для ионизации оставшихся связанных электронов, уменьшается.

Сравним полученные результаты с результатами расчётов по другим программам THERMOS_HFS, THERMOS_QZM и RESEOS, в основе которых заложена модель среднего атома и условие ЛТР, при этом плотностные эффекты учитываются согласованным образом. Отдельно отметим, что программы THERMOS_HFS, THERMOS_QZM входят в состав комплекса THERMOS, а код RESEOS разрабатывался А. Овечкиным в рамках диссертационной работы под руководством В.Г. Новикова. В программе RESEOS реализована модель ограниченного атома, именуемая также моделью Либермана [122].

Приведённые на рисунке 3.2 средние заряды ионов, полученные по программам THERMOS_QZM и RESEOS, отличаются по своему способу определения (произведение объёма атомной ячейки на плотность электронов на границе ячейки или за её пределами) от полученных по программам THERMOS_HFS и THERMOS_CRE (заряд ядра минус число электронов в связанных состояниях). Средние заряды ионов, полученные по программам THERMOS_QZM и RESEOS, не учитывают пространственную неоднородность плотности свободных электронов и поэтому в целом оказываются заниженными. Изотермы среднего заряда, рассчитанные по программам THERMOS_QZM и RESEOS (зелёная и оранжевая кривые соответственно), имеют плавное поведение, тогда как полученные по программам THERMOS_HFS и THERMOS_CRE (красная и синяя кривые соответственно) имеют изломы. Негладкое поведение кривых при увеличении плотности вещества вызвано переходом оболочек в непрерывный спектр. Отметим, что результаты, полученные по программе THERMOS_CRE с моделью СП для учёта эффектов плотности, хорошо согласуются с результатами рас-

чётов по программе THERMOS_HFS.

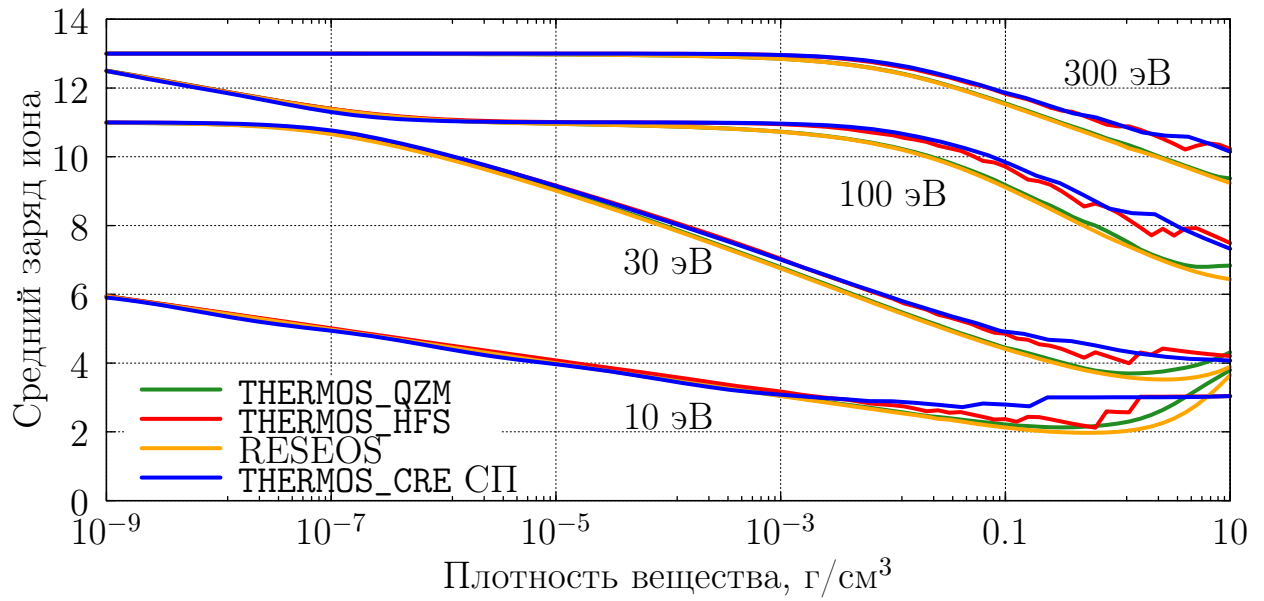


Рис. 3.2. Сравнение изотерм среднего заряда в плазме алюминия, рассчитанных в приближении ЛТП с помощью программ THERMOS_QZM (зелёная кривая), THERMOS_HFS (красная кривая), RESEOS (оранжевая кривая) и THERMOS_CRE (синяя кривая) с учётом снижения потенциалов ионизации по модели СП

На рисунке 3.3 приведены изотермы среднего заряда в плазме алюминия, рассчитанные в приближении прозрачной плазмы с помощью программы THERMOS_CRE с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП и ЭК: синяя и зелёная кривые соответственно, а красной кривой соответствует расчёт без учёта эффектов плотности.

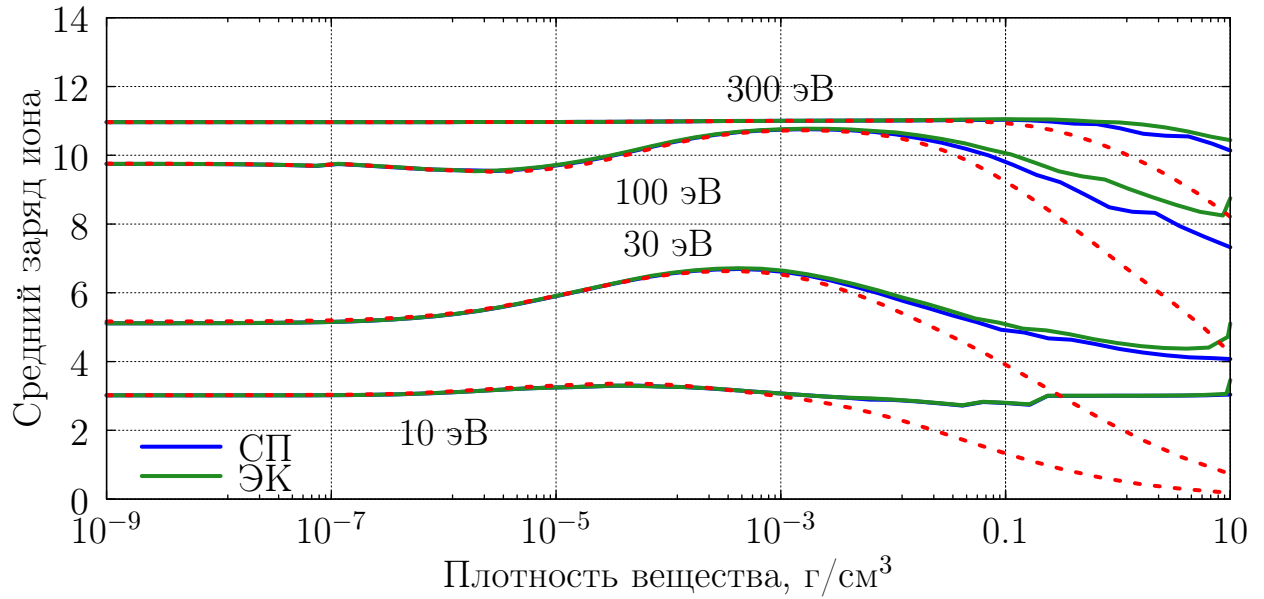


Рис. 3.3. Изотермы среднего заряда в плазме алюминия, рассчитанные в приближении прозрачной плазмы с помощью программы **THERMOS_CRE** с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП (синяя кривая) и ЭК (зелёная кривая), а также без учёта плотностных эффектов (красная кривая)

Ввиду того, что при расчётах используются базы атомных данных, имеющих ограничение по главному квантовому числу $n \leq n_{\max}$, необходимо искусственно понижать границу непрерывного спектра, чтобы устранить некорректное поведение коэффициента поглощения.

Рассмотрим, каким образом искусственное понижение границы непрерывного спектра, вызванного ограничением по главному квантовому числу $n \leq n_{\max}$ в используемой базе атомных данных, влияет на средний по Росселанду коэффициент поглощения на примере расчёта изотермы плазмы алюминия, находящейся в условиях ЛТР с температурой электронов 30 эВ и плотностей вещества в диапазоне от 10^{-9} до 10 г/см³. Здесь и ниже расчёты по программе **THERMOS_CRE** проводились с учётом эффектов плотности по модели СП для снижения потенциалов ионизации.

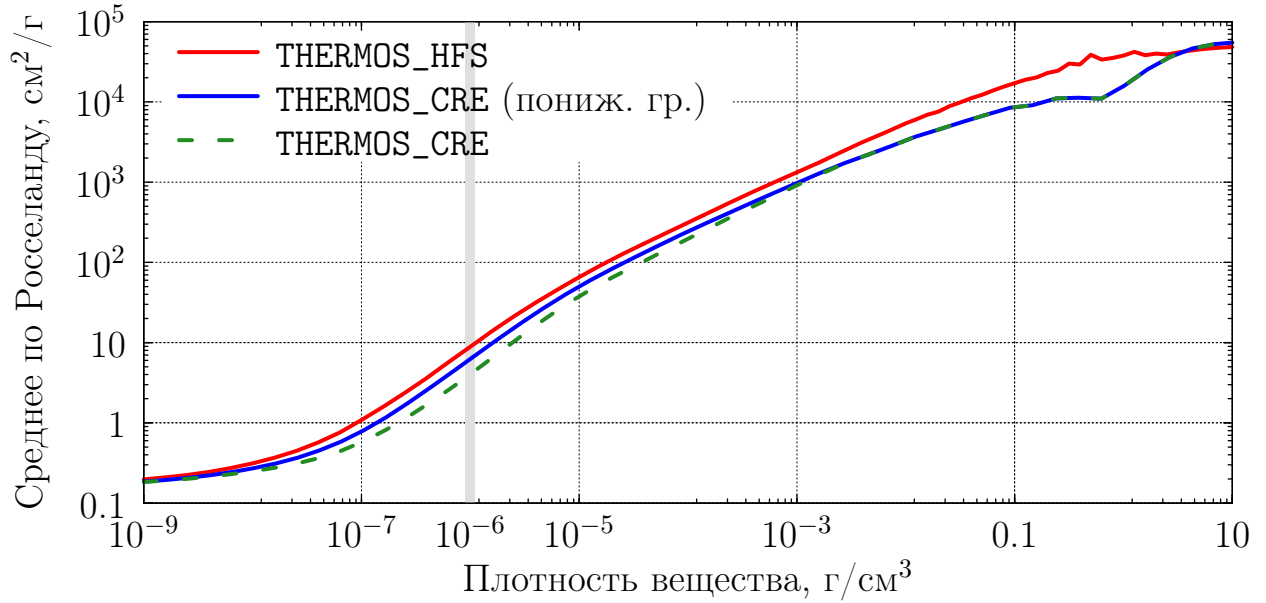


Рис. 3.4. Средние по Росселанду в плазме алюминия при температуре электронов $T_e = 30$ эВ, полученные по программам THERMOS_HFS (красная кривая), THERMOS_CRE с искусственным понижением границы непрерывного спектра (синяя кривая) и без понижения (зелёная кривая)

На рисунке 3.4 приведены результаты расчёта средних по Росселанду коэффициентов поглощения с помощью программы THERMOS_CRE с заданным планковским полем излучения при температуре $T_{rad} = T_e$ без понижения границы непрерывного спектра (зелёная штриховая кривая) и с искусственным понижением (синяя кривая) в сравнении с результатами, полученными по программе THERMOS_HFS (красная кривая).

Из результатов, представленных на рисунке 3.4, видно, что в диапазоне по плотности вещества от 10^{-8} до 1 г/см³ наблюдается заметное расхождение зависимостей зелёного и красного цвета, при этом стоит отметить, что искусственное понижение границы непрерывного спектра приводит к смещению кривой в диапазоне по плотности от 10^{-8} до 10^{-3} г/см³ в сторону более точного расчёта (см. синюю и красную кривые). В этом диапазоне основное отличие связано с искусственным понижением границы непрерывного спектра за счёт

ограничения по главному квантовому числу $n \leq n_{\max}$ в базе атомных данных. Для выделенного серым интервала, а именно: для плазмы алюминия при температуре электронов 30 эВ и плотности вещества 10^{-6} г/см³ проведено детальное сравнение коэффициентов поглощения (см. рисунок 3.5 (а)). Отметим,

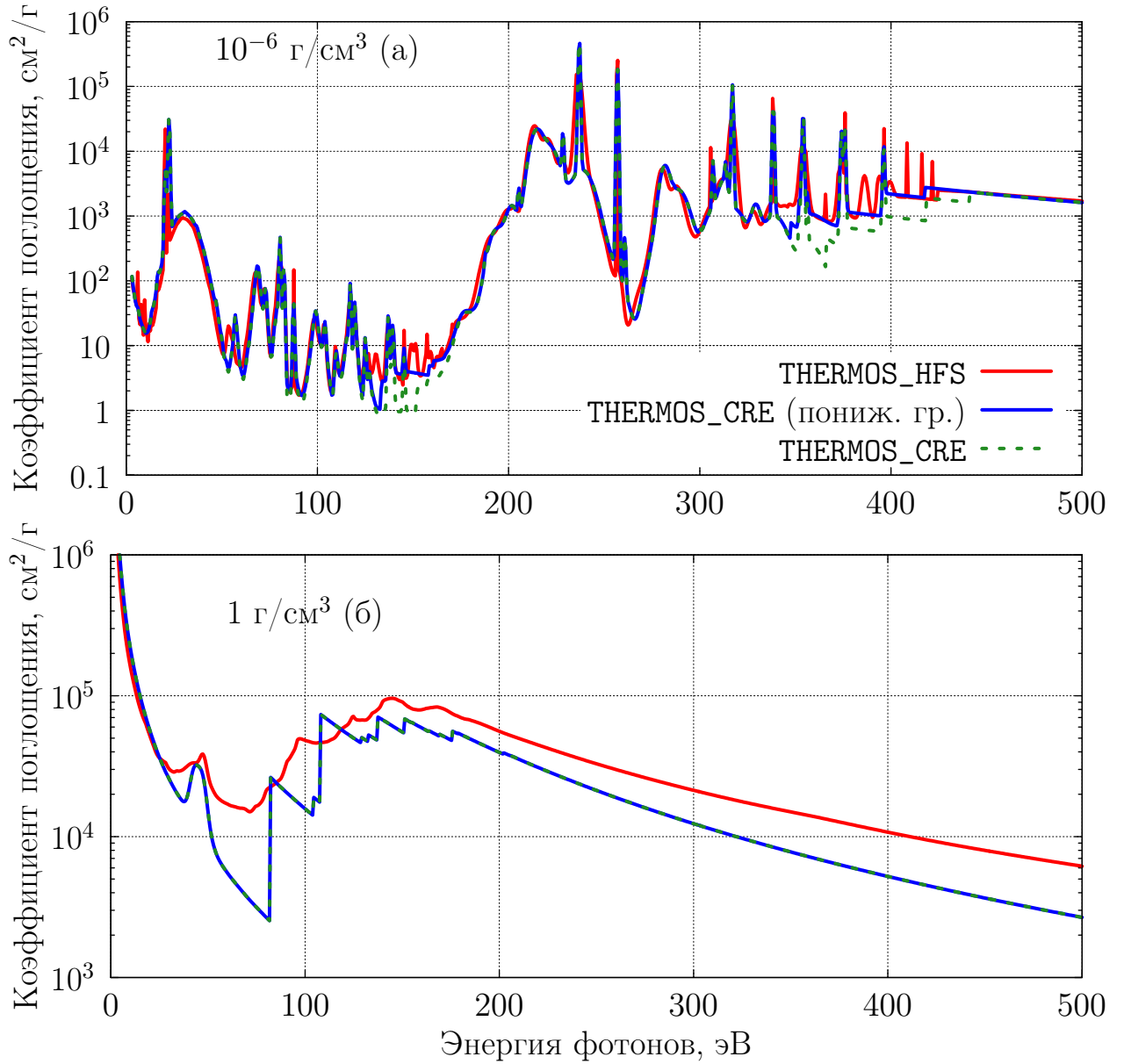


Рис. 3.5. Коэффициенты поглощения в плазме алюминия при температуре электронов $T_e = 30$ эВ и плотностях вещества $\rho = 10^{-6}$ г/см³ (а) и 1 г/см³ (б), рассчитанные по программе THERMOS_HFS (красная кривая), THERMOS_CRE с понижением границы непрерывного спектра (синяя кривая) и без понижения (зелёная кривая)

что для плотностей в диапазоне от 10^{-3} до 1 г/см^3 продолжает наблюдаться существенное расхождение результатов расчёта средних по Росселанду коэффициентов поглощения по программам **THERMOS_CRE** и **THERMOS_HFS**, несмотря на незначительные расхождения в среднем заряде (см. рисунок 3.2). Это можно объяснить тем, что в программе **THERMOS_HFS** используется размытие порогов непрерывного спектра в зависимости от чисел заполнения уровней, а в **THERMOS_CRE** размытие порогов отсутствует (см. рисунок 3.5 (б)).

3.1.2. Плазма железа

Выполним верификацию разработанной программы путём сравнения с результатами других авторов. Такая возможность всестороннего сравнения результатов расчётов разных научных групп доступна на семинарах по сравнению неравновесных кодов [45] – [52].

На 9-м семинаре NLTE [51] организаторами было предложено провести расчёты характеристик плазмы железа в широком диапазоне температур и плотностей. Верификацию моделей учёта плотностных эффектов, используемых в программе `THERMOS_CRE`, в качестве примера приведём только при $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$, так как при других (10^{14} , 10^{19} и 10^{22} см^{-3}) эффекты плотности незначительны [80]. Результаты, полученные с помощью моделей СП и ЭК, не сильно отличаются, поэтому на рисунках приведены только результаты с использованием модели СП для снижения потенциалов ионизации.

Рассчитаем изохору со следующим набором точек по температуре электронов: 30, 60, 120, 200, 400, 700, 1000, 2000 и 4000 эВ. Проведём сравнение с результатами других кодов, а также с результатами расчётов по программе `THERMOS_HFS`, так как при данной плотности и температурах (как будет показано ниже) плазма находится в состоянии, близком к ЛТР.

При расчётах использовалась комбинированная база атомных данных с ограничением для главного квантового числа $n \leq n_{\text{max}} = 6$, подготовленная на основе двух имеющихся баз данных: средней (получена в приближении изолированного иона) и детальной (получена в UTA приближении с помощью кода FAC [24]). Усреднение проводилось на специальной сетке по энергии фотонов на 5000 групп, включающей заданные организаторами семинара диапазоны для выдачи спектральных величин.

На рисунке 3.6 представлены изохоры среднего заряда в плазме железа при плотности электронов $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$, где синей кривой представлены ре-

результаты расчётов по программе THERMOS_CRE с моделью СП для снижения потенциалов ионизации, красной кривой соответствуют результаты расчётов по программе THERMOS_HFS, серыми кривыми приведены результаты других кодов-участников семинара. Следует отметить, что плотность при расчётах по программе THERMOS_HFS вычислялась, исходя из ионизации, полученной из расчётов по программе THERMOS_CRE. Таким образом, неизменность значения электронной плотности удовлетворялась с точностью до 5%. Из представленных на рисунке кривых можно сделать заключение, что при такой плотности электронов плазма будет равновесной вплоть до 1 кэВ. Приведённые результаты хорошо согласуются с данными других участников семинара.

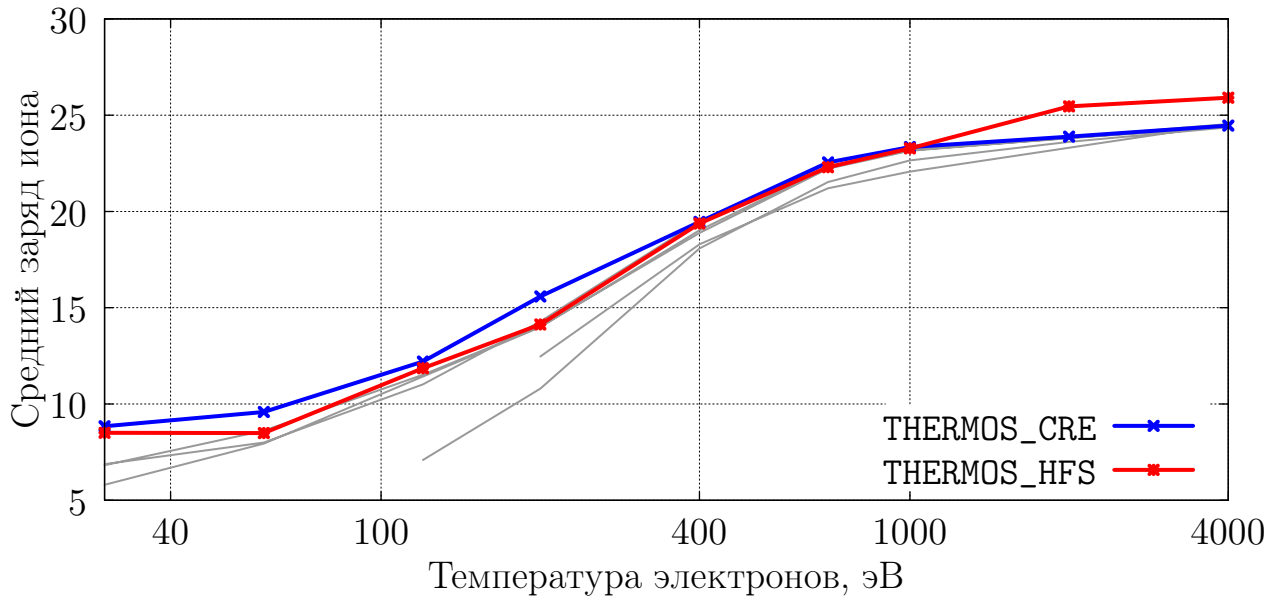


Рис. 3.6. Изохоры среднего заряда в плазме железа при плотности электронов $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$

Рассмотрим более подробно точку с плотностью электронов $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$ и температурой $T_e = 400 \text{ эВ}$. Ионизационное равновесие при этих условиях достигается в основном за счёт столкновительных процессов (см. рисунок 3.7), и плазма находится в состоянии, близком к ЛТР, что позволяет провести детальное сравнение с результатами расчётов по программе THERMOS_HFS. На

рисунке 3.7 приведены скорости полной ионизации и рекомбинации для иона кратности k , рассчитанные по следующим формулам

$$I_k = \frac{\sum_{s'} x_{ks} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}}{\sum_s x_{ks}}, \quad R_k = \frac{\sum_{s'} x_{ks} \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}}{\sum_s x_{ks}},$$

где α – суммарная скорость процессов ионизации (1.7) и рекомбинации (1.6).

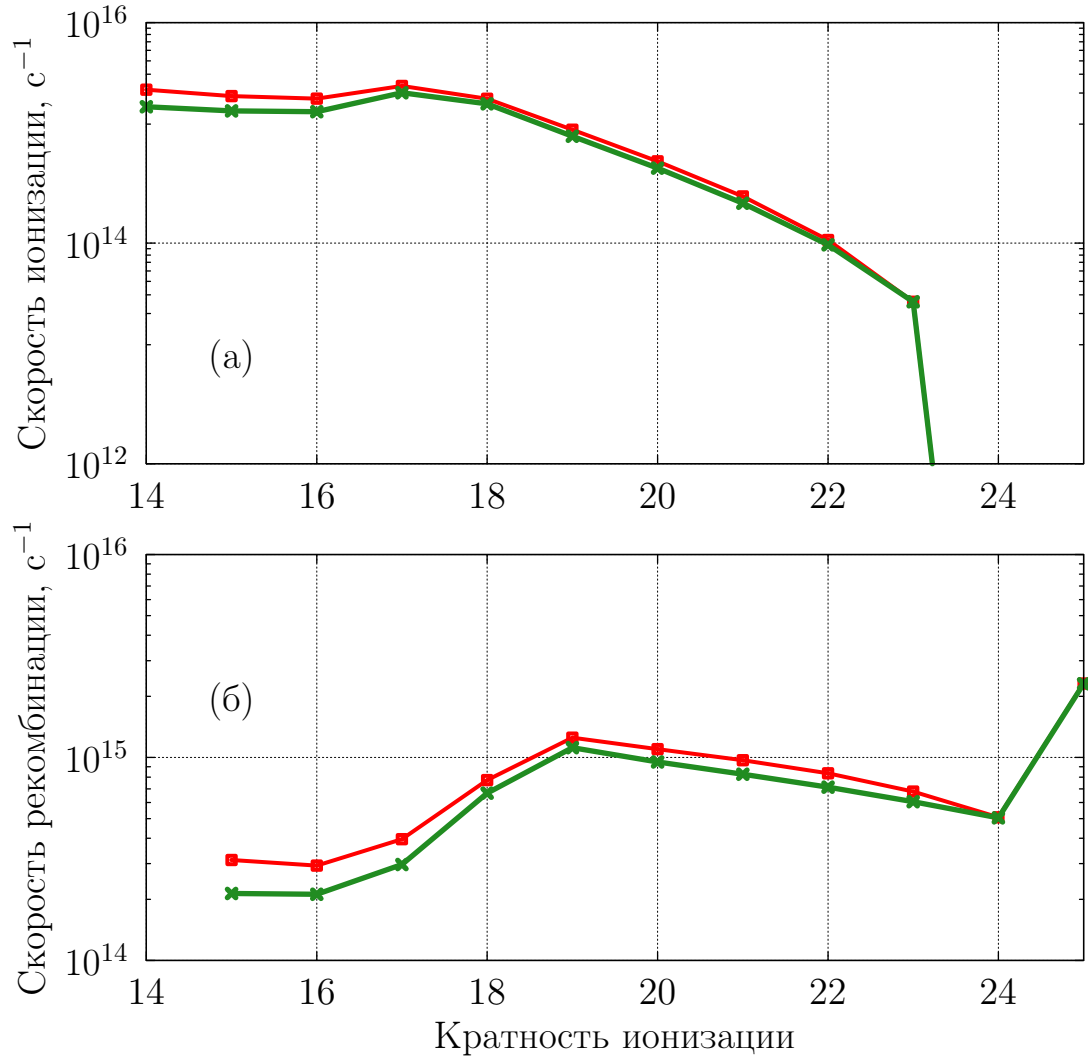


Рис. 3.7. Скорости полной (красная кривая) и столкновительной (зелёная кривая) ионизации (а) и рекомбинации (б) в зависимости от кратности ионизации в плазме железа, рассчитанные по программе THERMOS_CRE при температуре $T_e = 400$ эВ и плотности электронов $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$

При снижении потенциалов ионизации возбуждённые состояния с энер-

гиями связи выше порога ионизации ΔI отбрасывались, что уменьшало максимальное главное квантовое число $n_{\max}$ и набор учитываемых конфигураций. В выбранной точке после обрезания в базе атомных данных остались только конфигурации с главным квантовым числом $n \leq n_{\max} = 4$. В расчёте по модели МХФС также остались дискретными оболочки с главным квантовым числом $n \leq 4$.

По программам THERMOS_CRE и THERMOS_HFS ($\rho = 4,77 \text{ г/см}^3$) проведён расчёт среднего заряда иона, значения которого составили 19,46 и 19,38 соответственно. Отметим, что отличие результатов не превышает 5% относительно других участников 9-го семинара NLTE. На рисунке 3.8 приведено распределение вероятности по кратностям ионизации: красная кривая получена по программе THERMOS_CRE, синяя – THERMOS_HFS, серыми кривыми нанесены данные других участников семинара.

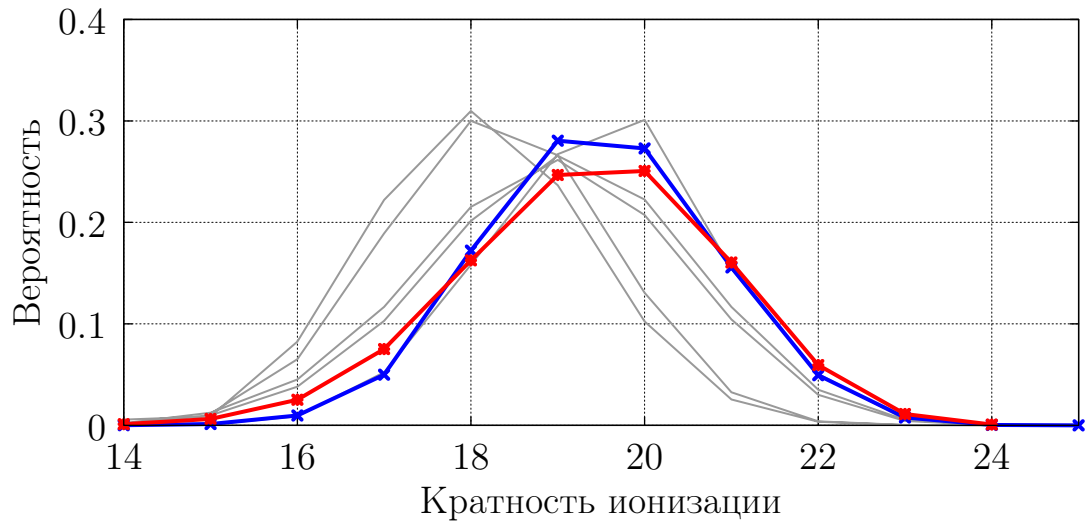


Рис. 3.8. Распределение вероятности по кратностям ионизации в плазме железа при температуре $T_e = 400 \text{ эВ}$ и плотности электронов $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$. Синяя кривая соответствует результатам THERMOS_CRE, красная – THERMOS_HFS

Как можно видеть из кривых, представленных на рисунке, результаты близки между собой и имеют сдвиг вправо относительно результатов других участников. Чтобы прояснить отличия, проведём сравнение энергий ионизации

ции, полученных в разных приближениях. Влияние плотностных эффектов в плазме можно описать разными способами. Так, например, при снижении потенциалов ионизации возбуждённые состояния с энергиями связи выше порога ионизации ΔI отбрасываются, что приводит к уменьшению максимального значения главного квантового числа n_{max} и количества учитываемых конфигураций. Этот подход используется в программе **THERMOS_CRE** для приведения базы атомных данных, полученной в приближении изолированного иона, в соответствие с заданной плотностью плазмы. Второй подход основан на понижении границы непрерывного спектра и используется в программе **THERMOS_HFS**. В этом случае потенциалы ионизации I_k^Q определяются как разница энергий между основными конфигурациями $I_k(Q) = \min_s E_{ks} - \min_{s'} E_{k+1,s'}$. Вычисление энергий конфигураций проводится по матричным элементам, полученным с помощью волновых функций среднего атома в самосогласованном потенциале. При определении вероятности иона кратности k в плазме решается система:

$$\begin{cases} \frac{P_{k+1}}{P_k} = \exp(-\tilde{\mu}/\theta) \frac{\Omega_{k+1}}{\Omega_k}, \\ \sum_k P_k = 1, \\ \sum_k k P_k = Z_0, \end{cases} \quad (3.1)$$

где $\tilde{\mu}$ – подправленное значение химического потенциала, а статистическая сумма иона определяется как

$$\Omega_k = \sum_s g_{k,s} \exp\left(-\frac{E_{k,s} - E_{k_0,s_0}}{\theta}\right),$$

где E_{k_0,s_0} – энергия конфигурации с числами заполнения наиболее близкими среднему иону. В последнем уравнении системы (3.1) предполагается, что ионизация плазмы по МХФС определена верно. Из решения этой системы получается подправленное значение химического потенциала $\tilde{\mu}$, с помощью

которого можно вычислить сдвиг границы непрерывного спектра

$$\Delta\varepsilon_0 = \mu - \tilde{\mu},$$

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0 - \Delta\varepsilon_0,$$

где μ и ε_0 – химический потенциал и граница непрерывного спектра, полученные в самосогласованном потенциале. В случае среднего атома граница непрерывного спектра $\tilde{\varepsilon}_0$ будет одной и той же для всех кратностей ионизации.

Таблица 3.1. Значения потенциалов ионизации в эВ из базы атомных данных (БД), полученной в приближении изолированного иона, из базы NIST [63], по программе THERMOS_CRE с использованием моделей СП и ЭК и по программе THERMOS_HFS (МХФС), для плазмы железа при температуре $T_e = 400$ эВ и плотности электронов $n_e = 10^{24}$ см $^{-3}$ ($\rho = 4,77$ г/см 3)

Ион	БД	NIST	МХФС		СП	ЭК
			I_k^Q	$I_k^Q(\text{corr})$		
14	453,11	456,20	434,25	170,27	258,90	99,01
15	488,66	489,31	474,91	210,93	281,51	110,96
16	1270,08	1262,70	1236,41	972,43	1049,98	868,77
17	1368,92	1357,80	1347,99	1084,02	1135,88	944,01
18	1470,66	1460,00	1459,58	1195,60	1224,66	1022,13
19	1575,26	1575,60	1571,16	1307,18	1316,32	1103,13
20	1682,70	1687,00	1682,74	1418,76	1410,81	1186,96
21	1792,95	1798,40	1794,32	1530,34	1508,12	1273,61
22	1945,14	1950,40	1945,46	1681,48	1647,36	1402,19
23	2046,44	2045,76	2043,88	1779,90	1735,71	1479,88
24	8838,67	8828,19			8514,99	8248,51

В таблице 3.1 приведены потенциалы ионизации, полученные из базы

атомных данных в приближении изолированного иона (БД), из базы NIST [63], по программе THERMOS_CRE с использованием моделей снижения потенциалов ионизации СП и ЭК и по программе THERMOS_HFS (МХФС), для плазмы железа при температуре $T_e = 400$ эВ и плотности электронов $n_e = 10^{24}$ см $^{-3}$. Из сравнительного анализа видно, что значения потенциалов ионизации из базы данных в случае изолированного иона фактически совпадают с NIST для иона кратности $k = 19$, однако для $k < 19$ оказываются завышены, в то время как для $k > 19$ немного занижены. В случае использования модели среднего атома (МХФС) в таблице приведены два значения I_k^Q и $I_k^Q(\text{corr})$. Первое из них I_k^Q соответствует разнице энергий между основными конфигурациями $I_k(Q) = \min_s E_{ks} - \min_{s'} E_{k+1,s'}$. Второе $I_k^Q(\text{corr})$ получается со сниженной границей непрерывного спектра $\tilde{\varepsilon}_0$. При данных условиях снижение границы непрерывного спектра составило $\Delta\varepsilon_0 = 264$ эВ.

На рисунке 3.9 приведены потенциалы ионизации в выбранной точке: полученные по разным кодам-участникам NLTE (серые кривые), значения энергий ионизации из таблицы, соответствующие моделям МХФС (красная и чёрная кривые) и СП (синяя кривая). Из представленных на рисунке результатов видно, что приведённые значения довольно близки, при этом коды используют как модели снижения потенциалов ионизации, так и снижение границы непрерывного спектра.

Значения I_k^Q хотя и рассчитаны с волновыми функциями связанных электронов, полученными в приближении среднего атома, не учитывают основной плотностной эффект, который заключается во взаимодействии связанных и свободных электронов. Этот эффект учитывается при нахождении скорректированного химического потенциала $\tilde{\mu}$ и, следовательно, при нахождении величины $I_k^Q(\text{corr})$.

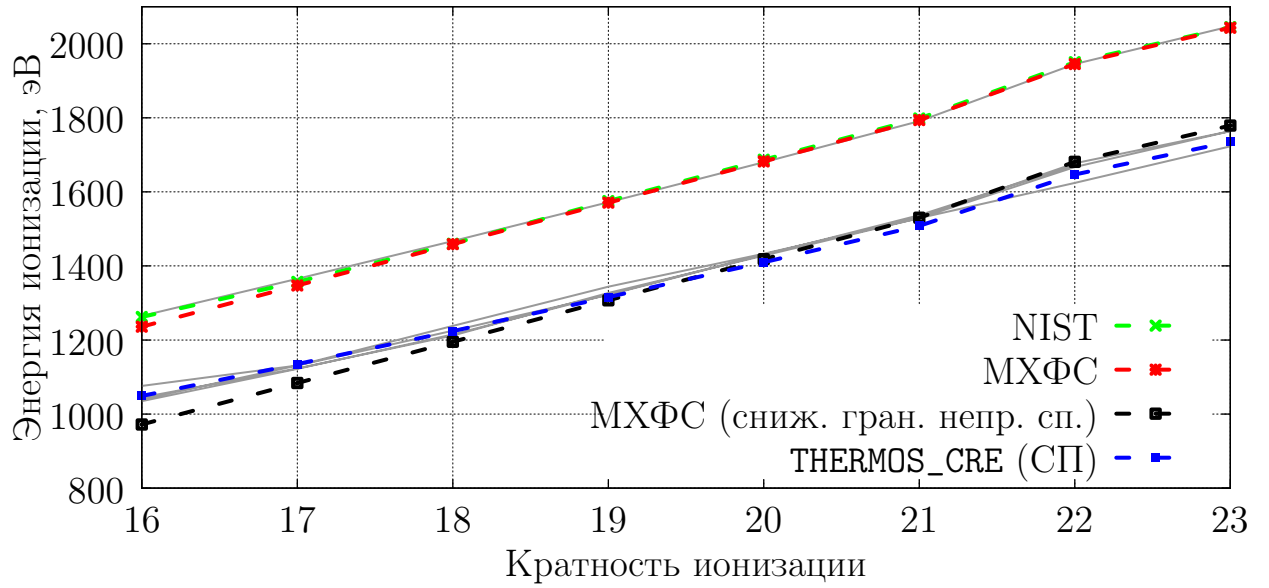


Рис. 3.9. Энергия ионизации в плазме железа. Приведены данные участников 9-го семинара NLTE (серые кривые), данные библиотеки NIST (зелёная кривая). Данные THERMOS_HFS (MXФС) приведены без учёта (красная кривая) и с учётом (чёрная кривая) снижения границы непрерывного спектра. Синяя кривая соответствует расчёту по программе THERMOS_CRE с использованием модели СП для снижения потенциалов ионизации. Расчёты выполнены при температуре $T_e = 400$ эВ и плотности электронов $n_e = 10^{24}$ см $^{-3}$ ($\rho = 4,77$ г/см 3)

На рисунках 3.10 и 3.11 приведена излучательная способность плазмы железа при температуре $T_e = 400$ эВ и плотности электронов $n_e = 10^{24}$ см $^{-3}$, полученная по программам THERMOS_HFS (красная кривая) и THERMOS_CRE (синяя кривая) в сравнении с результатами других участников 9-го семинара NLTE (серые кривые). Представленные на рисунке 3.10 данные соответствуют диапазону спектральных линий, соответствующих переходам $np \rightarrow 1s$ и захватывают порог фотоионизации уровня $1s$ для ионов разной кратности в плотной плазме. Как можно видеть, сечения для оболочки с главным квантовым числом $n = 2$, полученные по программе THERMOS_CRE, намного ниже – в то время как сечения для $n = 1$ совпадают с другими кодами. Уширение

порога близко к остальным кодам. Из сравнения видно, что в результате расчёта по программе THERMOS_HFS получаются завышенные значения сечений и сдвиг общего массива линий относительно всех кодов. Ширины линий в кодах THERMOS_CRE и THERMOS_HFS фактически совпадают. Расчёт по программе THERMOS_CRE проводился на основе комбинированной БД с использованием UTA методики, поэтому уширение линий завышено по сравнению с другими кодами.

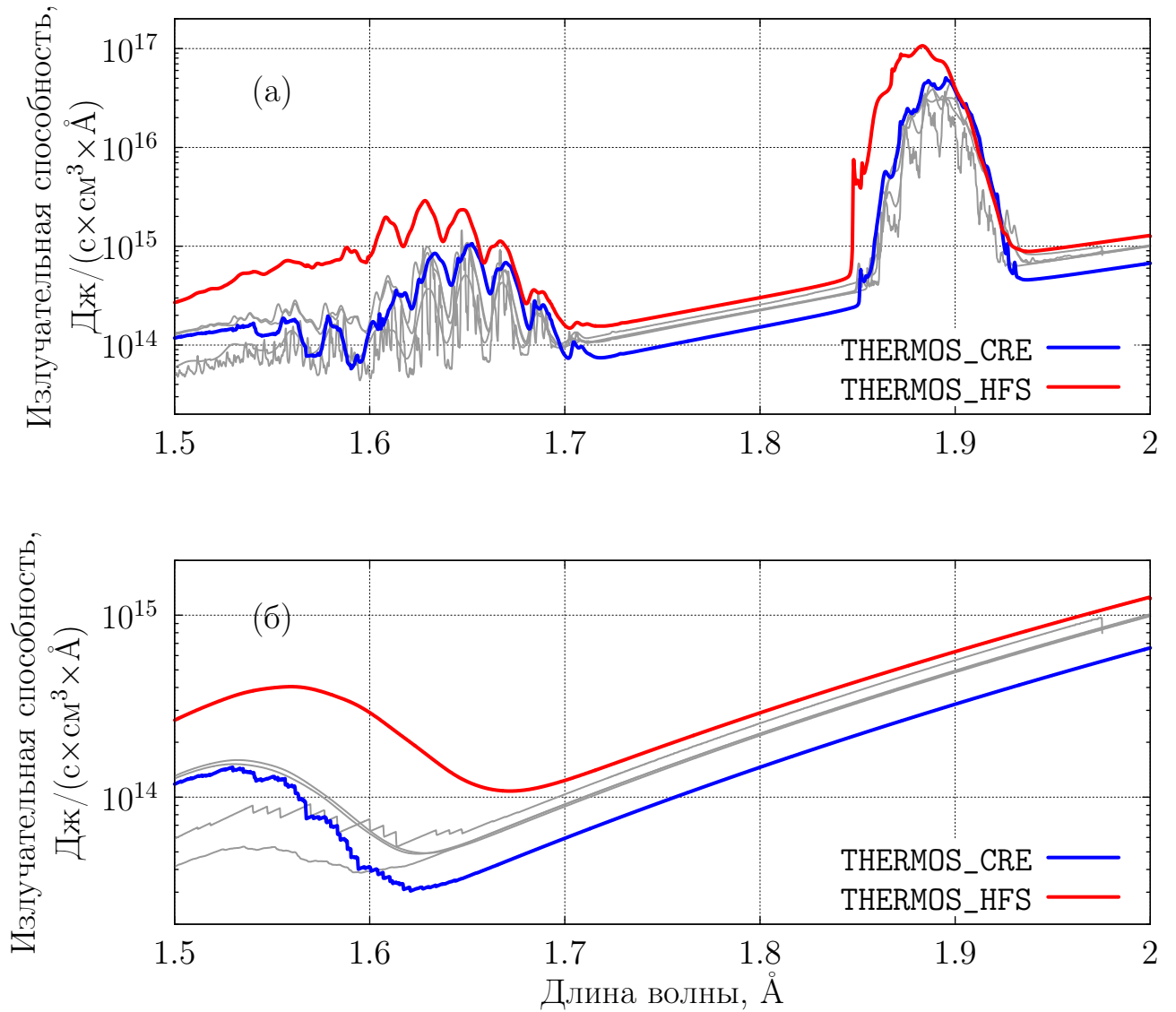


Рис. 3.10. Полная излучательная способность (а) и только при фоторекомбинации (б) в плазме железа с температурой $T_e = 400$ эВ и плотностью электронов $n_e = 10^{24}$ см $^{-3}$

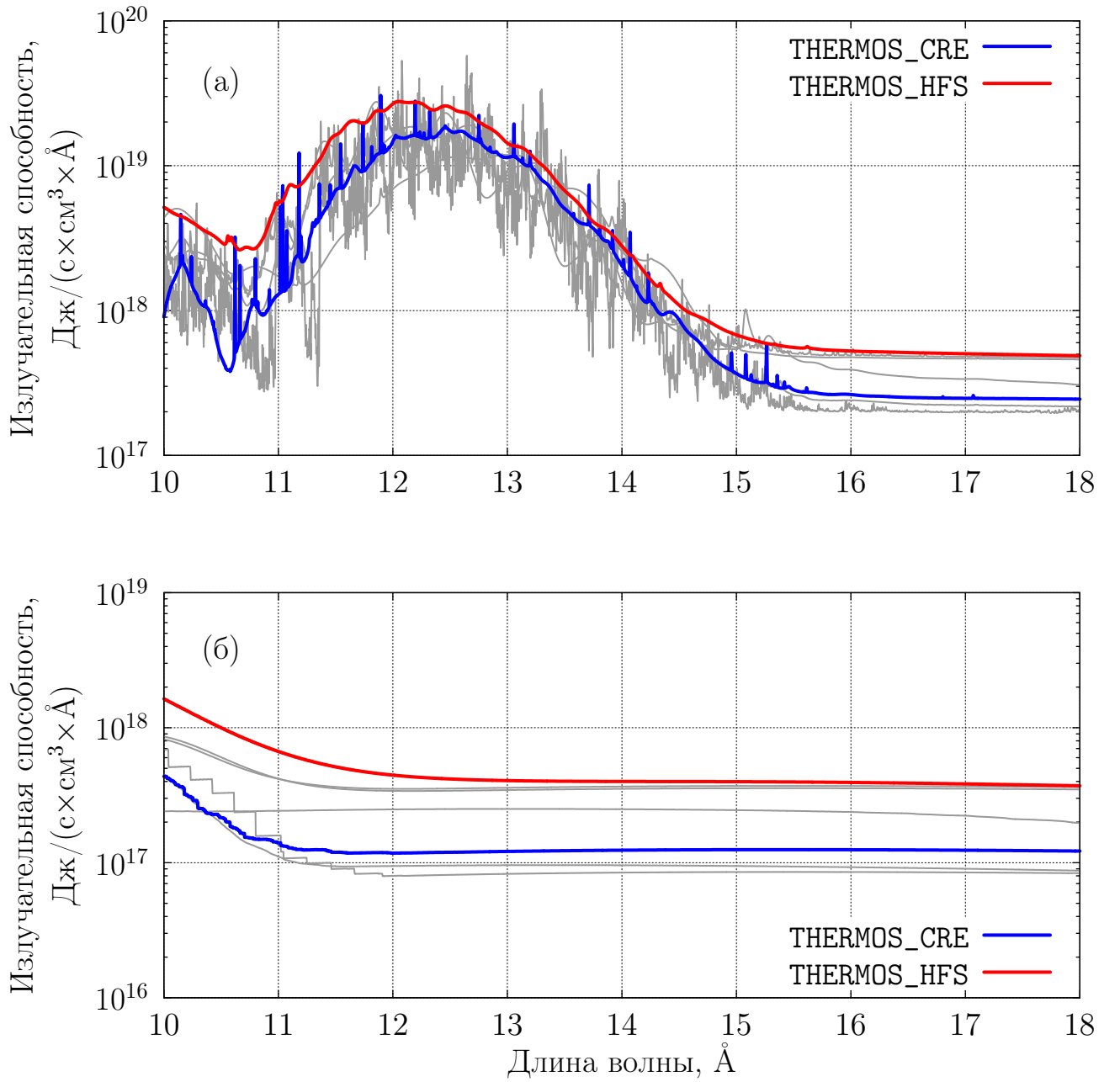


Рис. 3.11. Полная излучательная способность (а) и только при фоторекомбинации (б) в плазме железа с температурой $T_e = 400$ эВ и плотностью электронов $n_e = 10^{24} \text{ см}^{-3}$

Данные, представленные на рисунке 3.11, соответствуют диапазону переходов $3\ell \rightarrow 2\ell'$ и захватывают пороги фоторекомбинации $2\ell'$ для ионов разной кратности. В результате сравнительного анализа можно сделать вывод, что сечения для оболочки с главным квантовым числом $n = 3$, полученные по программе THERMOS_CRE, близки к остальным кодам-участникам. Уширение

порогов 2ℓ также близко к остальным кодам-участникам. Отличие сечений, полученных по программам THERMOS_CRE и THERMOS_HFS, связано с разницей в числах заполнения уровня с главным квантовым числом $n = 3$. Отметим, что часть кодов по величине фоторекомбинации совпадает с результатами расчёта THERMOS_CRE, а другая часть – THERMOS_HFS. Положение общего массива линий $2\ell \rightarrow 3\ell'$ близко к другим кодам.

Проведённый сравнительный анализ полученных результатов с другими моделями и программами на примерах для плазмы алюминия и железа показал, что учёт плотностных эффектов по моделям СП или ЭК в модели СИР позволил значительно расширить область применимости для плотностей вещества выше $0,01 \text{ г/см}^3$.

3.2. Горячие электроны в плазме ванадия

Проведём исследование предложенного метода учёта горячих электронов и верификацию программы THERMOS_CRE путём сравнения полученных результатов с независимыми результатами расчётов других научных групп, участвующих в международных семинарах по сравнению неравновесных кодов [45] – [52].

В качестве одного из случаев на 11-м семинаре по сравнению неравновесных кодов NLTE [143] организаторами было предложено провести моделирование плазмы ванадия в приближении прозрачной плазмы ($T_{rad}=0$) для заданных электронных температур и ионных плотностей при условии наличия в плазме фиксированной доли горячих электронов с температурой 10 кэВ (см. таблицу 3.2).

Таблица 3.2. Параметры расчётов для плазмы ванадия

T_e , эВ	Горячие электроны	n_e , см ⁻³	Спектральный диапазон
2, 5, 10, 20, 50, 100	$T_h = 10$ кэВ с долей $f_h = 10^{-3}$ и 0,1 от n_i	$n_e = Z_0 \times n_i$ с $n_i = 5 \times 10^{21}$, $5 \times 10^{22}, 5 \times 10^{23}$	(1) 20 – 200 эВ, $\delta\varepsilon = 0,2$ эВ (901 точка) (2) 4500 – 6500 эВ, $\delta\varepsilon = 0,5$ эВ (4001 точка)

Влияние наличия горячих электронов в плазме ванадия на скорости ионизации продемонстрировано на примере результатов расчётов, полученных для электронной температуры 100 эВ и ионной плотности 5×10^{22} см⁻³ при фиксированных долях 0; 0,1% и 10% горячих электронов. Как и следовало ожидать, наличие даже небольшой доли горячих электронов в плазме приводит к увеличению скорости ионизации для ионов высокой кратности

(см. рисунки 3.12 – 3.13). На рисунках приведены результаты расчётов с учётом эффектов плотности в приближении ЭК для снижения потенциалов ионизации.

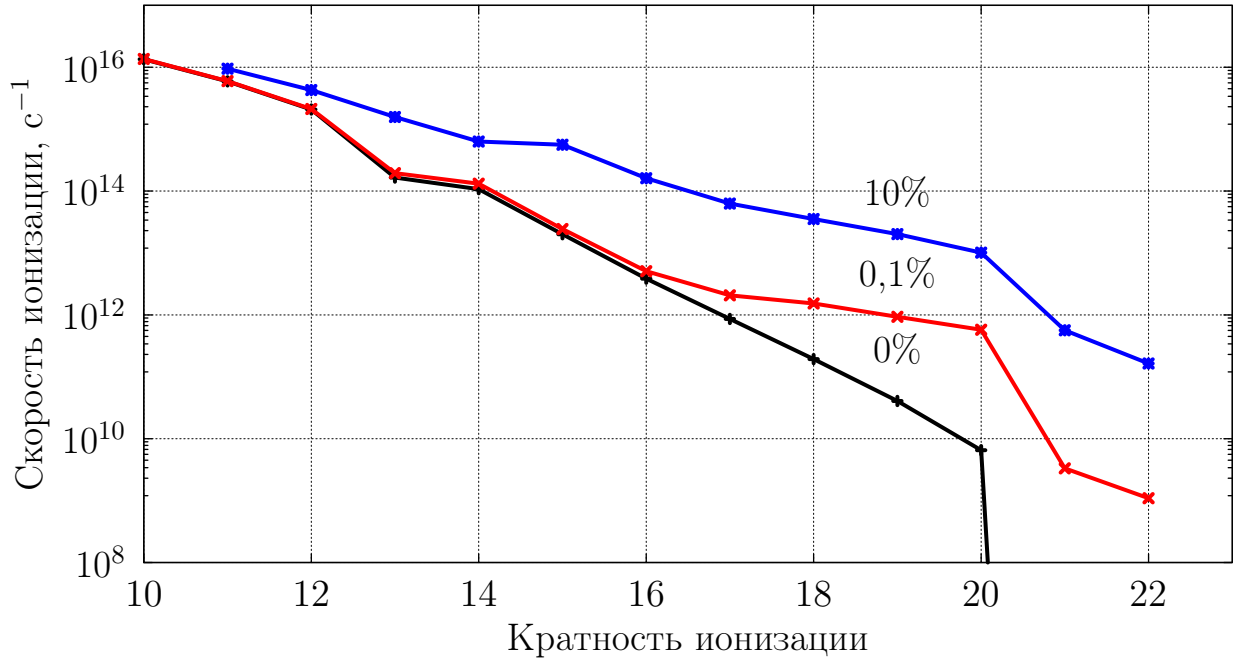


Рис. 3.12. Скорость ионизации в зависимости от кратности иона для электронной температуры $T_e = 100$ эВ и ионной плотности $n_i = 5 \times 10^{22}$ см⁻³ без учёта горячих электронов (черная кривая), а также с 0,1% (красная кривая) и 10% (синяя кривая)

Из анализа списка случаев, представленных в таблице 3.2, можно заключить, что помимо присутствия в плазме горячих электронов также важную роль играют плотностные эффекты. Поэтому дополнительно рассмотрим результаты расчётов без учёта плотностных эффектов и с их учётом по моделям СП и ЭК. На рисунках 3.14 и 3.15 представлены результаты расчётов среднего заряда иона при наличии 10% горячих электронов в плазме ванадия в сравнении с результатами других участников семинара NLTE11 (кривые серого цвета). Важно отметить, что результаты расчётов с учётом снижения потенциалов ионизации по модели СП находятся внутри области разброса результатов других участников семинара.

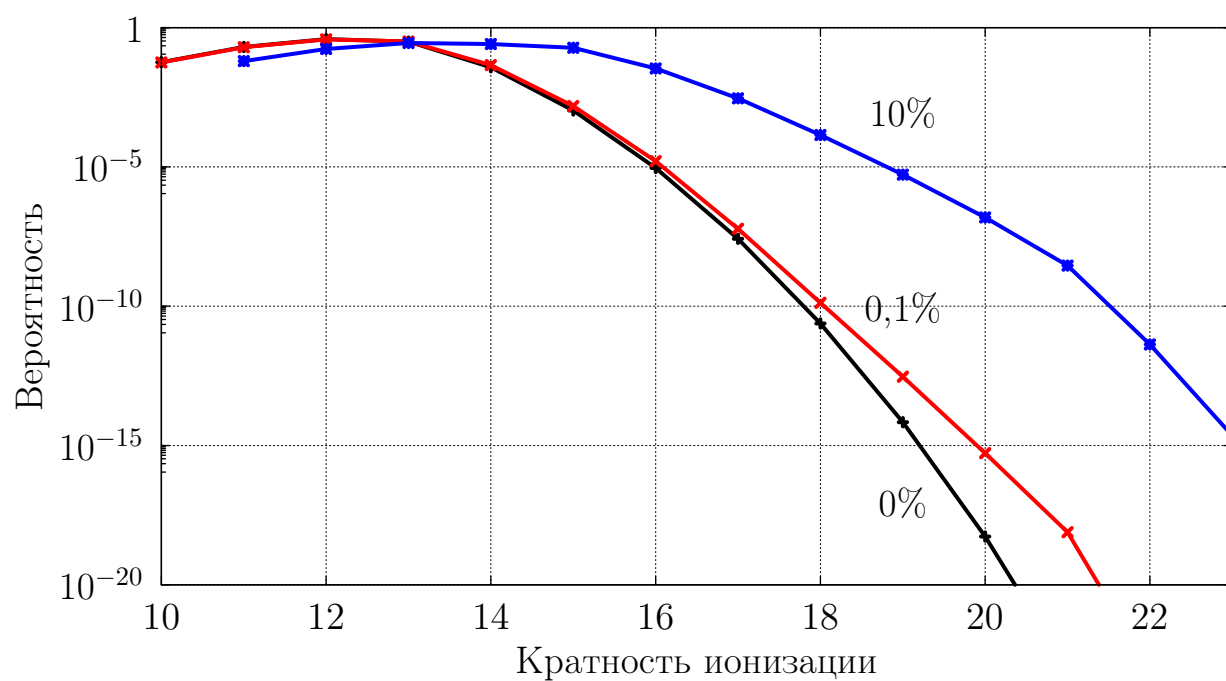


Рис. 3.13. Распределение вероятности по кратностям ионизации для электронной температуры $T_e = 100$ эВ и ионной плотности $n_i = 5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$ без учёта горячих электронов (черная кривая), а также с 0,1% (красная кривая) и 10% (синяя кривая)

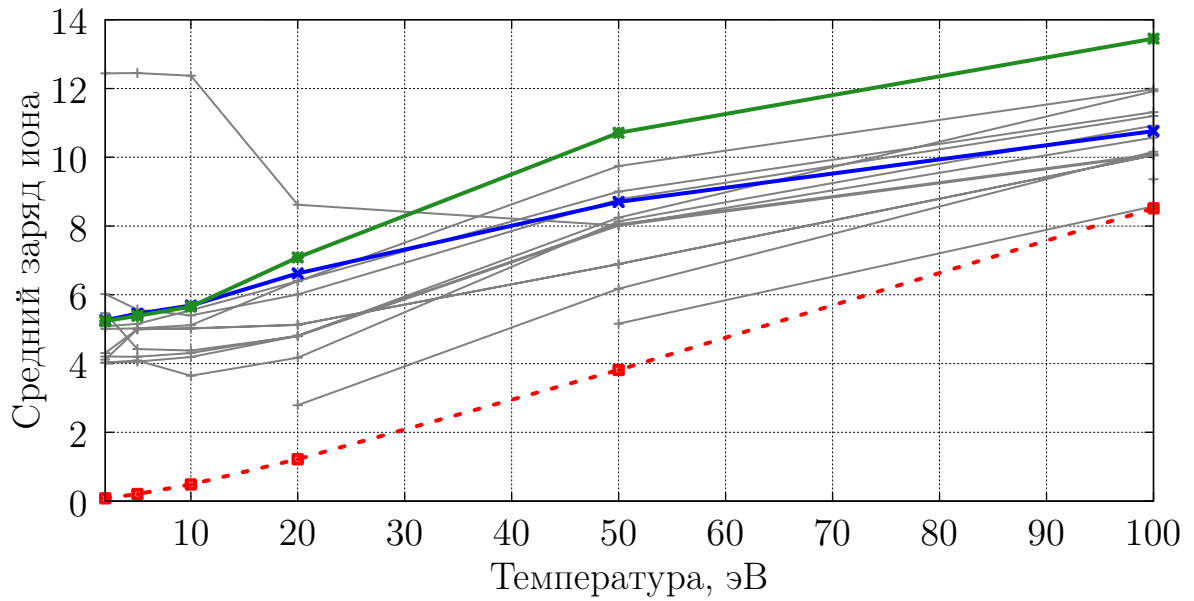


Рис. 3.14. Зависимость среднего заряда иона от температуры при фиксированной плотности ионов $5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$ и с 10% горячих электронов $T_h = 10 \text{ кэВ}$ без учёта плотностных эффектов (красная кривая) и с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП (синяя кривая) и ЭК (зелёная кривая)

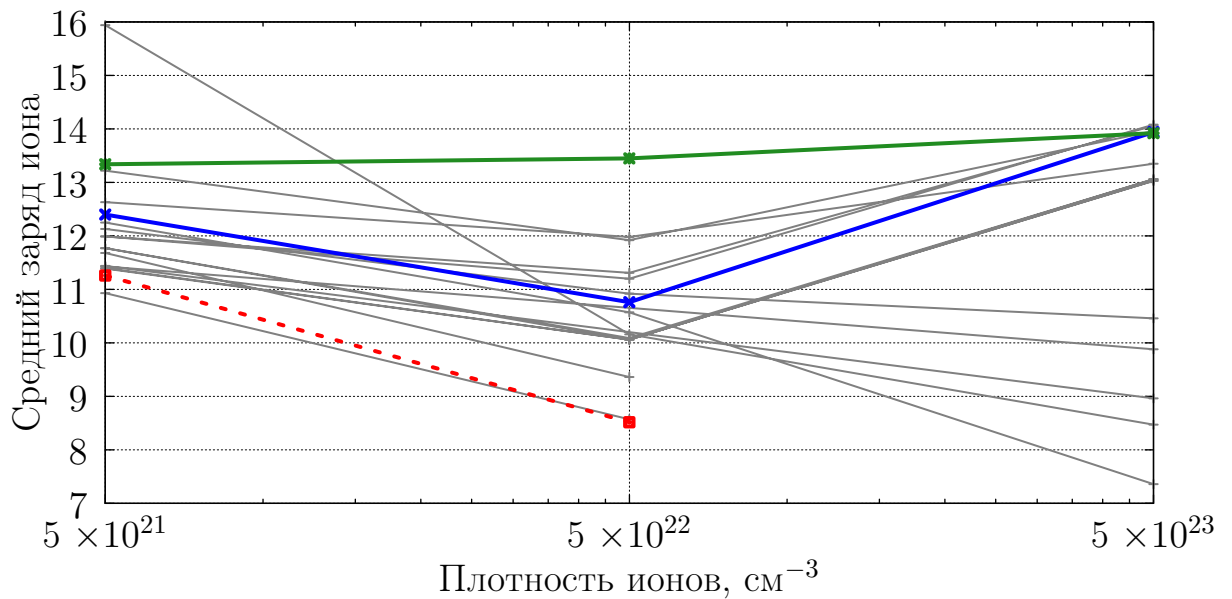


Рис. 3.15. Зависимость среднего заряда иона от плотности ионов при фиксированной температуре 100 эВ и с 10% долей горячих электронов $T_h = 10 \text{ кэВ}$. Приведены результаты расчётов без учёта плотностных эффектов (красная кривая) и с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП (синяя кривая) и ЭК (зелёная кривая)

На рисунках 3.16 – 3.18 представлены результаты расчётов среднего заряда иона, вероятности, спектральных коэффициентов излучения и поглощения для электронной температуры 100 эВ и ионной плотности $5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$ с 10% горячих электронов $T_h = 10 \text{ кэВ}$ в сравнении с результатами других участников семинара NLTE11 (кривые серого цвета).

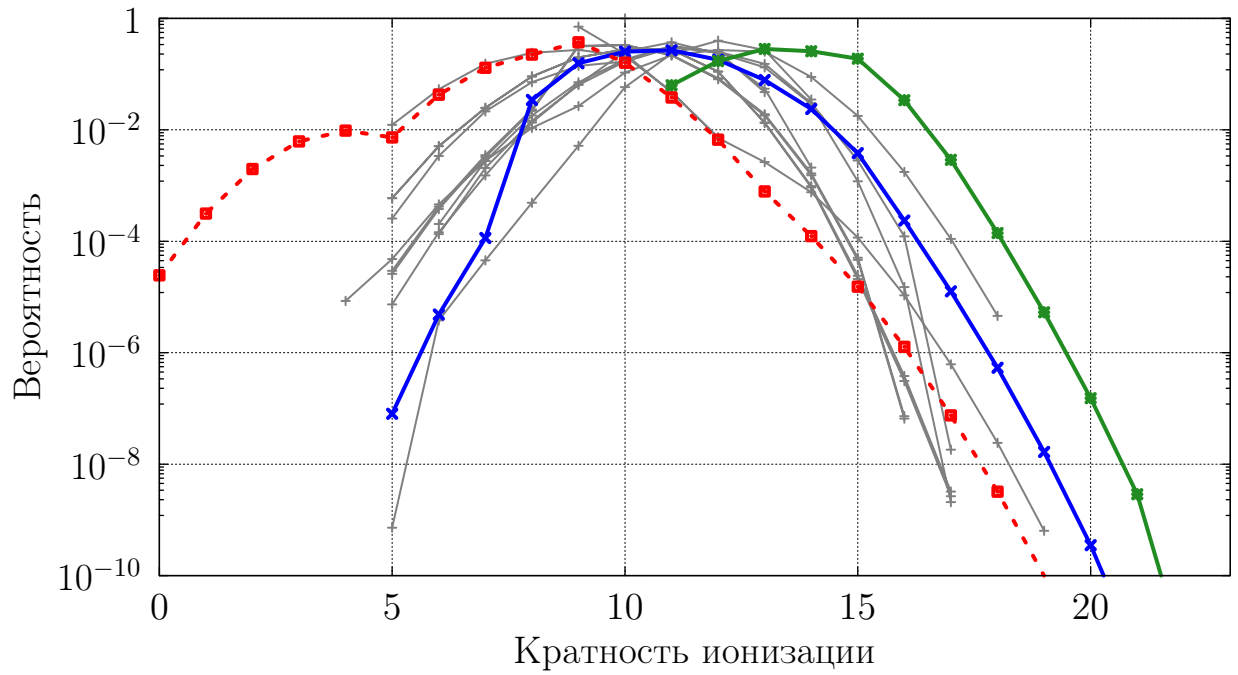


Рис. 3.16. Распределение вероятности по кратностям ионизации для электронной температуры $T_e = 100 \text{ эВ}$ и ионной плотности $n_i = 5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$ с 10% горячих электронов $T_h = 10 \text{ кэВ}$ без учёта плотностных эффектов (красная кривая) и с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП (синяя кривая) и ЭК (зелёная кривая)

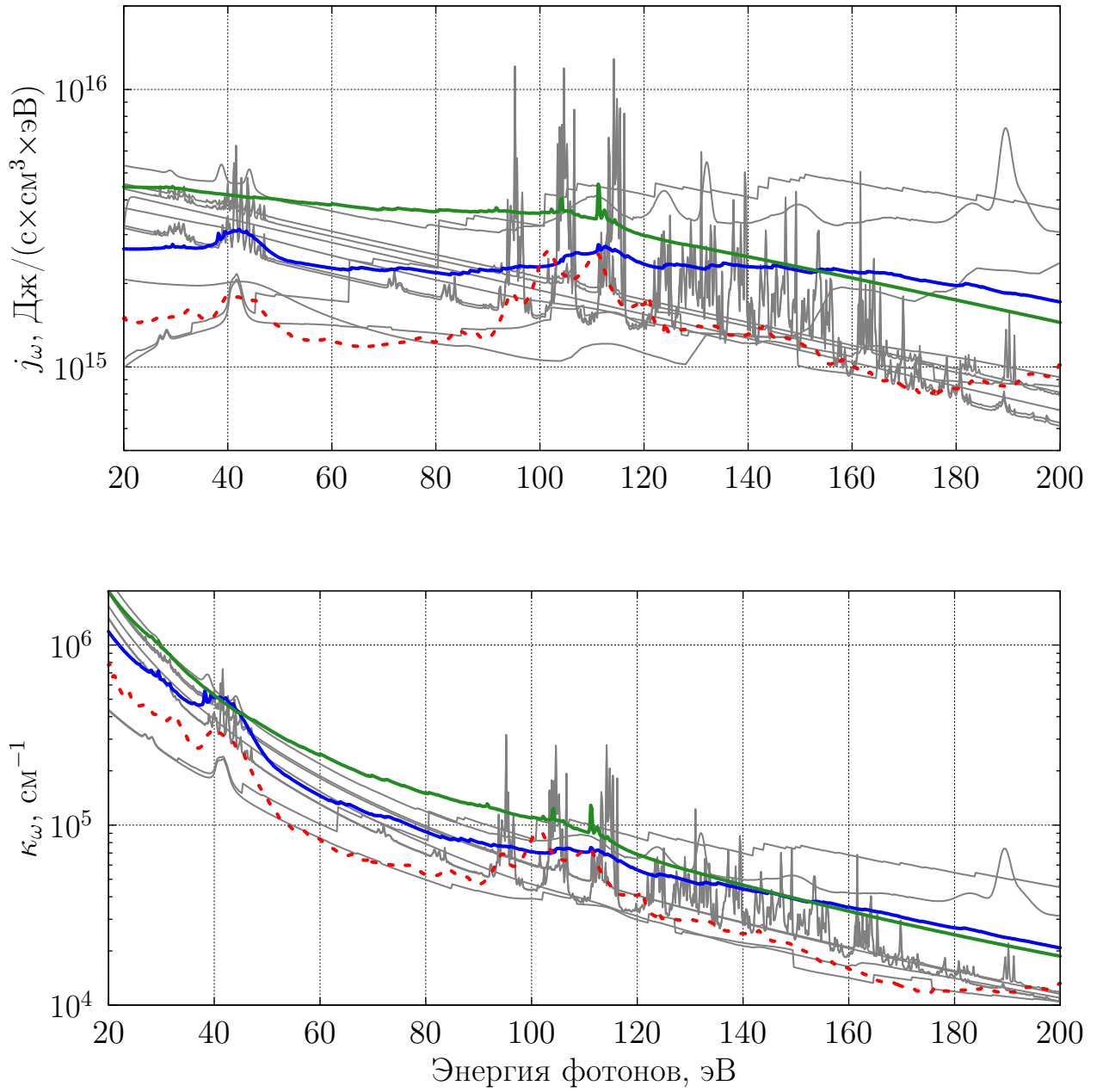


Рис. 3.17. Спектральные коэффициенты излучения и поглощения в плазме ванадия при температуре $T_e = 100$ эВ и ионной плотности $n_i = 5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ с 10% горячих электронов $T_h = 10$ кэВ без учёта плотностных эффектов (красная кривая) и с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП (синяя кривая) и ЭК (зелёная кривая)

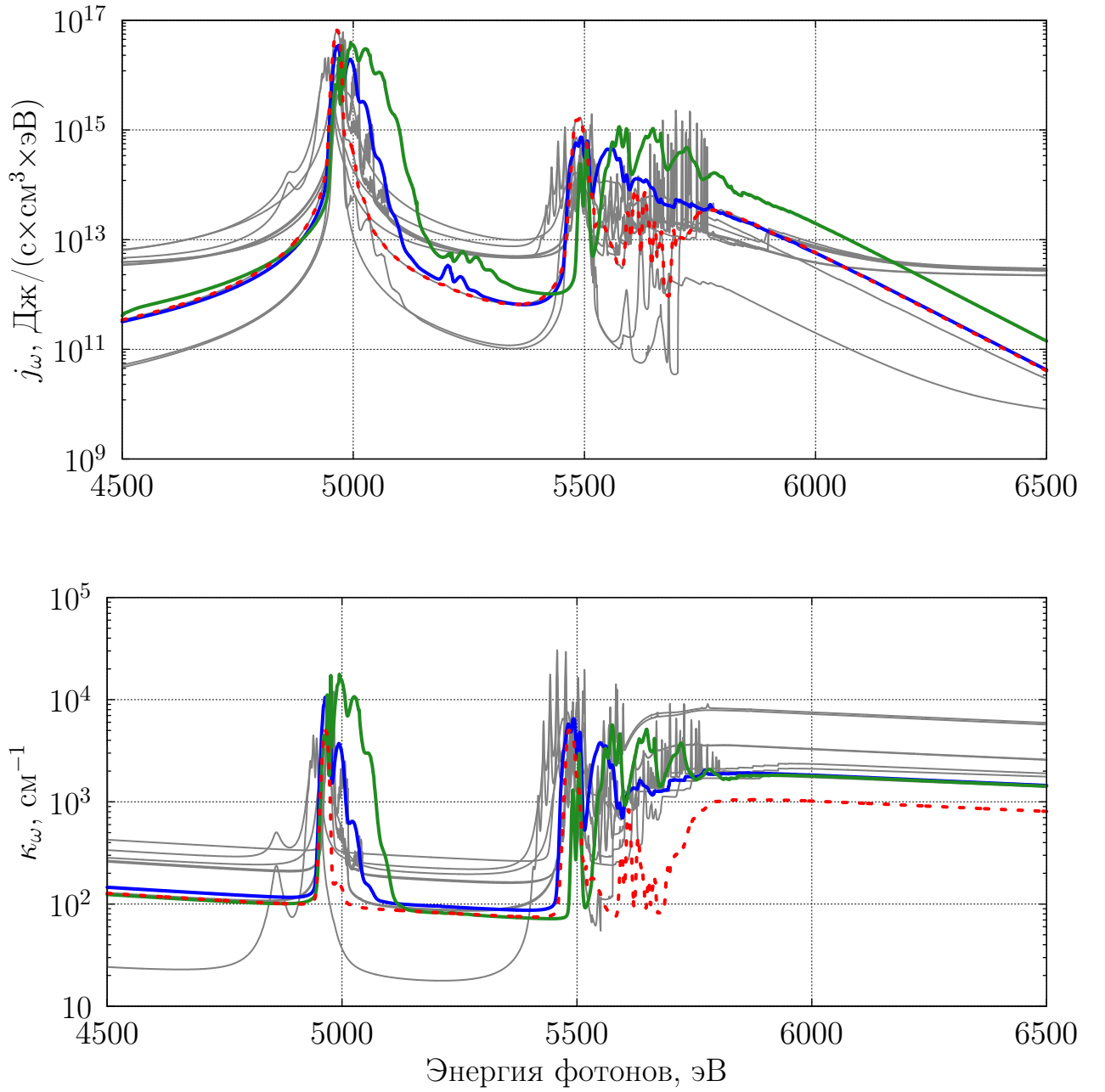


Рис. 3.18. Спектральные коэффициенты излучения и поглощения в плазме ванадия при температуре $T_e = 100$ эВ и ионной плотности $n_i = 5 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$ с 10% долей горячих электронов $T_h = 10$ кэВ без учёта плотностных эффектов (красная кривая) и с учётом снижения потенциалов ионизации по моделям СП (синяя кривая) и ЭК (зелёная кривая)

В результате проведённого сравнительного анализа, принимая во внимание, что участники семинара также предоставили результаты расчётов без учёта эффектов плотности и с их учётом по различным моделям для снижения потенциалов ионизации (в том числе моделям СП и ЭК), можно сделать вывод: результаты расчётов по программе THERMOS_CRE лежат в пределах погрешности используемых приближений.

3.3. Исследование оптически прозрачной и плотной плазмы в разных геометриях

Код `THERMOS_Layer` позволяет численно исследовать излучающую плазму в широком диапазоне параметров. Чтобы убедиться в корректности проводимых вычислений, прежде всего необходимо проверить, воспроизводит ли данный код известные зависимости, полученные в приближениях оптически плотной ($\tau \gg 1$) и оптически прозрачной ($\tau \ll 1$) плазмы.

В качестве оптически плотной плазмы рассмотрим ионизованное вещество в состоянии ЛТР. В данном случае условие ($\tau \gg 1$) выполняется для фотонов с любой энергией. При этом односторонний спектральный поток излучения, вне зависимости от геометрии источника, имеет вид планковской функции

$$F_\omega = \pi B_\omega, \quad (3.2)$$

где

$$B_\omega(T_{rad}) = \frac{15}{\pi^5} \sigma \omega^3 \frac{1}{\exp(\omega/T_{rad}) - 1},$$

σ – постоянная Стефана-Больцмана.

Действительно, если в выражении для потока с правой границы бесконечного плоского слоя толщиной L (2.6) положить ($\tau \gg 1$), получим:

$$F_\omega(z = L, \mu > 0)|_{\tau \rightarrow \infty} = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}. \quad (3.3)$$

Такое же выражение можно получить для сферы и бесконечного цилиндра, проведя интегрирование по углам в (2.21) и (2.25) по внешней полусфере и полагая для случая ЛТР $I_\omega(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}$. Тогда получим для сферы

$$F_\omega(r = R) = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[2\pi \int_0^1 \mu d\mu \right] = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}, \quad (3.4)$$

для цилиндра

$$F_\omega(r = R) = \frac{j_\omega}{\kappa_\omega} \left[4 \int_0^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi \int_0^{\pi/2} \sin^2 \theta d\theta \right] = \pi \frac{j_\omega}{\kappa_\omega}. \quad (3.5)$$

В случае ЛТР имеет место закон Кирхгофа $\frac{j_\omega}{\kappa_\omega} = B_\omega$, и выражения (3.3), (3.4) и (3.5) приобретают вид (3.2). Для неоднородной плазмы, при условии выполнения ЛТР в каждой точке пространства, выходящий поток определяется температурой поверхности T_{surf} :

$$F_\omega = \pi \frac{j_\omega(T = T_{surf})}{\kappa_\omega(T = T_{surf})} = \pi B_\omega(T = T_{surf}). \quad (3.6)$$

Теперь рассмотрим противоположный предельный случай оптически прозрачной плазмы. Полагая ($\tau \ll 1$) в (2.6) для бесконечного однородного плоского слоя толщиной L , имеем

$$F_\omega(z = L, \mu > 0)|_{\tau \rightarrow 0} = 2\pi j_\omega L. \quad (3.7)$$

Чтобы получить выражения для потока в случаях цилиндрической и сферической геометрий, проинтегрируем уравнение переноса излучения по углам

$$\begin{aligned} \int_\Omega d\Omega : \quad (\mathbf{\Omega} \nabla) I_\omega &= j_\omega - \kappa_\omega I_\omega \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad \text{div } \mathbf{F}_\omega &= 4\pi j_\omega - c\kappa_\omega U_\omega. \end{aligned}$$

Для оптически прозрачной плазмы поглощением можно пренебречь:

$$\text{div } \mathbf{F}_\omega = 4\pi j_\omega.$$

Воспользуемся формулой Остроградского-Гаусса для вектора $\mathbf{F}_\omega$:

$$\oint_V \text{div } \mathbf{F}_\omega dV = \oint_S (\mathbf{F}_\omega \mathbf{n}) dS,$$

где $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали к поверхности S .

Тогда для сферы радиуса R получим:

$$F_\omega(r = R) = \frac{4\pi}{3} j_\omega R, \quad (3.8)$$

а для бесконечного цилиндра радиуса R :

$$F_{\omega}(r = R) = 2\pi j_{\omega} R. \quad (3.9)$$

С помощью аналогичных рассуждений можно получить выражения для спектрального потока излучения с поверхности неоднородной оптически прозрачной плазмы, в частности: для плоского слоя

$$F_{\omega}(z = L, \mu > 0) = 2\pi \sum_{i=1}^N j_{\omega}^{(i)}(z_i - z_{i-1}), \quad (3.10)$$

для сферы

$$F_{\omega}(r = R) = \frac{4\pi}{3} \frac{1}{R^2} \sum_{i=1}^N j_{\omega}^{(i)}(r_i^3 - r_{i-1}^3), \quad (3.11)$$

для цилиндра

$$F_{\omega}(r = R) = 2\pi \frac{1}{R} \sum_{i=1}^N j_{\omega}^{(i)}(r_i^2 - r_{i-1}^2), \quad (3.12)$$

где N – число подслоёв.

Для проведения тестовых расчётов выберем плазму кремния. Разобьём слой толщиной R (плоский, сферический или цилиндрический) на $N = 5$ подслоёв одинаковой ширины $\Delta r = \frac{R}{N}$. Каждый из подслоёв имеет свою температуру электронов T_i , плотность вещества ρ_i , коэффициент поглощения $\kappa_{\omega}^{(i)}$ и излучательную способность $j_{\omega}^{(i)}$. Заметим также, что сфера и цилиндр не имеют внутренних полостей ($r_0 = 0, r_N = R$) и поток в центре равен нулю. В случае плоского слоя поток на левой границе отличается от нуля и равен по модулю потоку с правой границы в случае, если слой однородный или неоднородный, но симметричный.

Сначала рассмотрим однородную плазму с температурой электронов $T_i = 40$ эВ, $i = 1, \dots, N$. Чтобы определить параметры, при которых удовлетворяются условия оптически плотной и оптически прозрачной плазмы, проведём предварительный расчёт изотерм среднего заряда иона Z_0 для вы-

бранной температуры $T = 40$ эВ в отсутствие поля излучения $T_{rad} = 0$ и с планковским полем излучения $T_{rad} = T$ (см. рисунок 3.19).

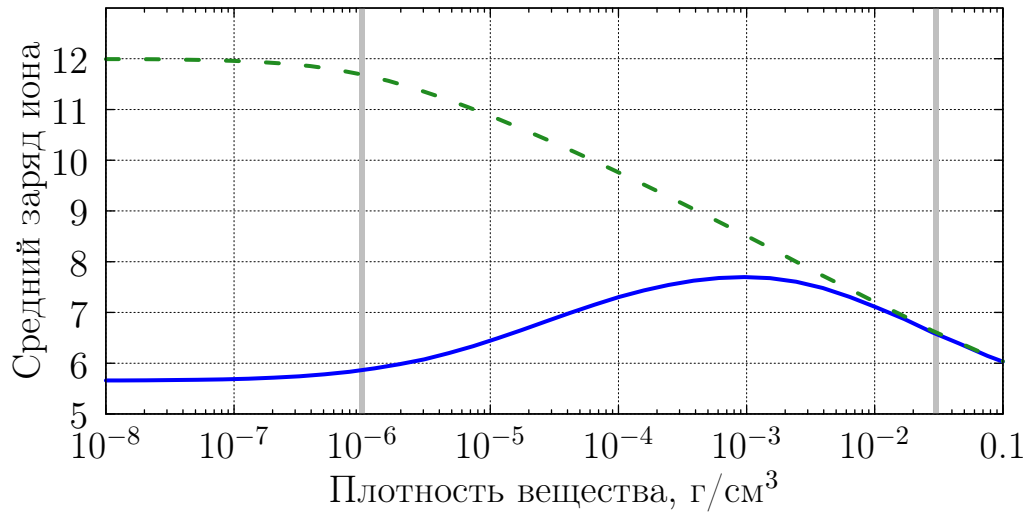


Рис. 3.19. Изотермы среднего заряда иона в плазме кремния при температуре электронов $T = 40$ эВ для оптически прозрачной плазмы $T_{rad} = 0$ (синяя кривая) и с планковским полем излучения $T_{rad} = T$ (зелёная кривая)

На рисунке 3.19 серыми вертикальными линиями отмечены значения плотностей, которые были выбраны для проверки решения в пределе оптически прозрачной плазмы $\rho = 10^{-6}$ г/см³ (существенное отличие от ЛТР) и в пределе оптически плотной плазмы $\rho = 0,03$ г/см³ (выполняются условия ЛТР). Помимо выбора плотностей также требуется подобрать размеры слоя, исходя из величины свободного пробега фотонов $l_\omega = \kappa_\omega^{-1}$. В случае оптически прозрачной плазмы размер слоя должен быть меньше величины свободного пробега фотонов с любой энергией в исследуемом диапазоне $R < l_\omega, \forall \omega$, а в случае оптически плотной плазмы все фотоны должны поглощаться внутри любого из подслоёв, то есть $\Delta r > l_\omega, \forall \omega$. На рисунке 3.20 приведены результаты расчётов свободного пробега фотонов в плазме кремния с температурой электронов $T = 40$ эВ и выбранными значениями плотностей $\rho = 10^{-6}$ г/см³ и $\rho = 0,03$ г/см³. Исходя из этих данных, можно выбрать размеры для тестовых расчётов в приближении оптически прозрачной плазмы: $\Delta r = 0,02$ см,

$R = 0,1$ см и оптически плотной плазмы: $\Delta r = 0,2$ см, $R = 1$ см.

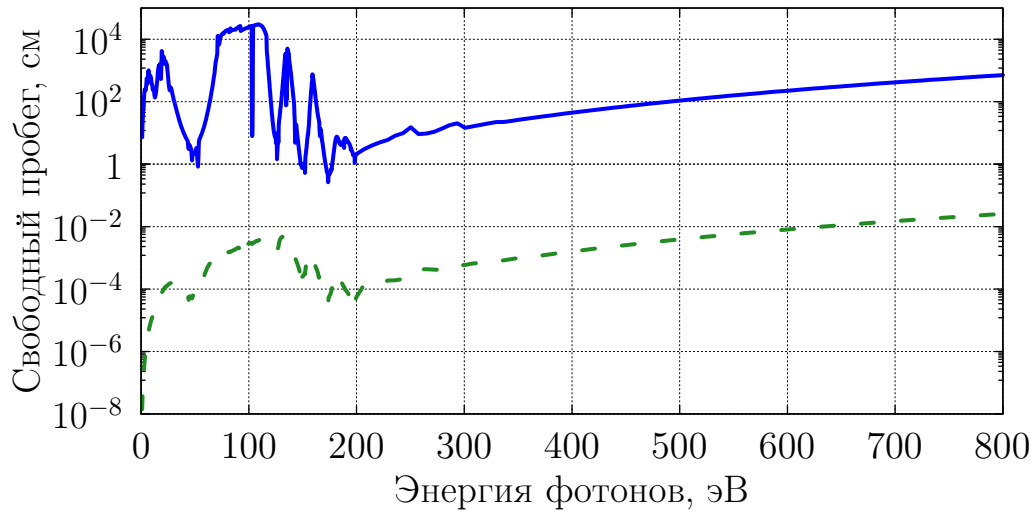


Рис. 3.20. Свободный пробег фотонов в плазме кремния при температуре электронов $T = 40$ эВ и плотностях $\rho = 10^{-6}$ г/см³ (синяя кривая) и $\rho = 0,03$ г/см³ (зелёная кривая)

На рисунке 3.21 приведено сравнение спектрального потока энергии излучения, рассчитанного по программе **THERMOS_Layer** в случае однородной оптически прозрачной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, со значениями, вычисленными по формулам (3.7), (3.8), (3.9) (чёрные кривые). На рисунке 3.22 приведены кривые для спектрального потока энергии излучения в случае однородной оптически плотной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученные по программе **THERMOS_Layer**, а также значения потока, вычисленные по формулам (3.3), (3.4), (3.5) (чёрные кривые), и поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела с температурой $T_{rad} = 40$ эВ (серая кривая).

В случае однородной оптически прозрачной плазмы результаты расчётов совпадают с 99% точностью с теоретическими значениями. В случае ЛТР наблюдается расхождение между рассчитанными значениями потока и функцией $\pi B_{\omega}(T_{surf})$, которое в интеграле может составлять до 10%. Это обусловлено тем, что используемые при расчёте атомные модели не позволяют

добиться идеального выполнения закона Кирхгофа из-за невозможности составления полной системы квантовых состояний ионов и приближённого учёта профиля линий.

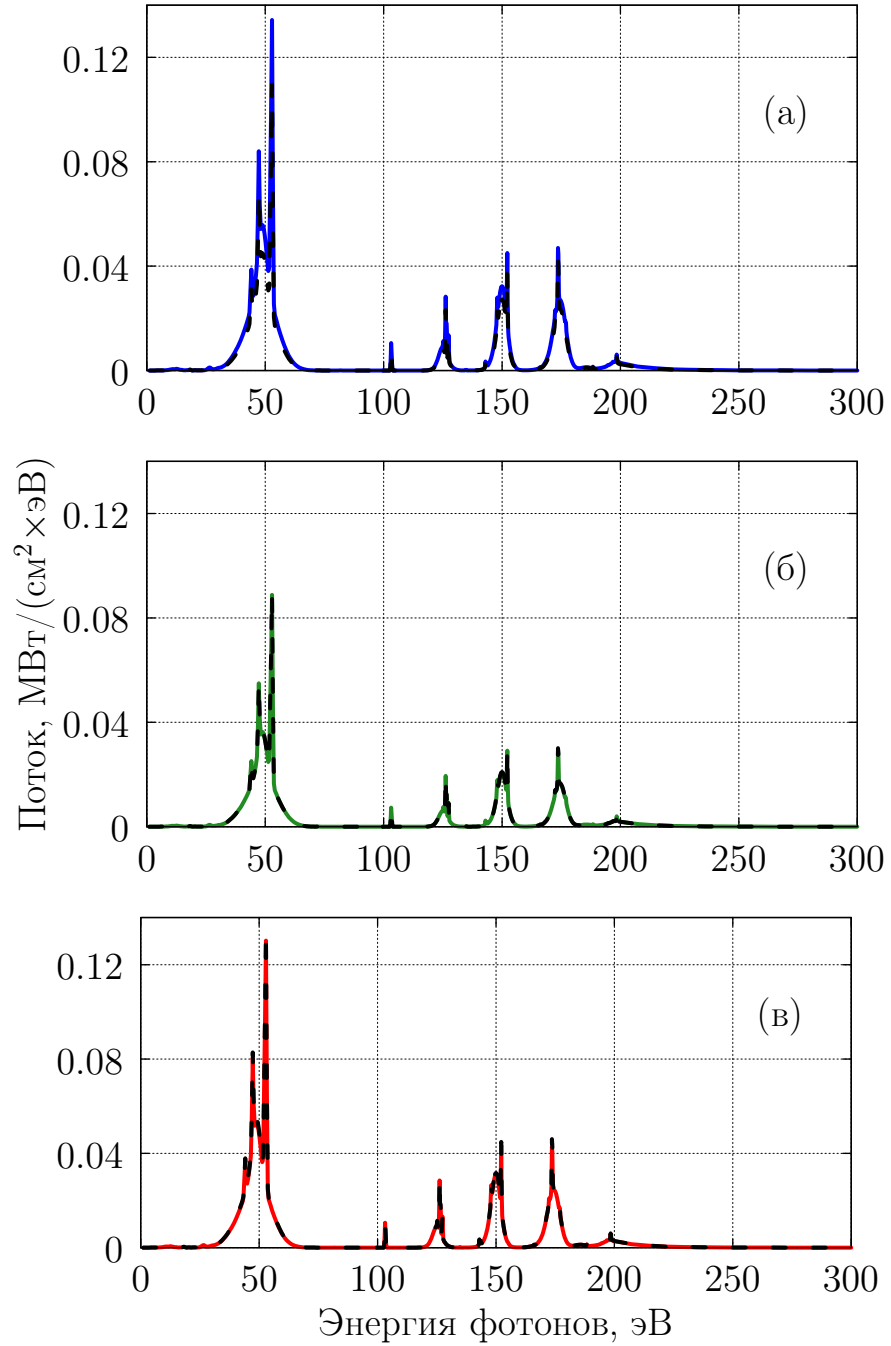


Рис. 3.21. Спектральный поток энергии излучения в случае однородной оптически прозрачной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы THERMOS_Layer и вычисленный по формулам (3.7) (а), (3.8) (б), (3.9) (в) (чёрные кривые)

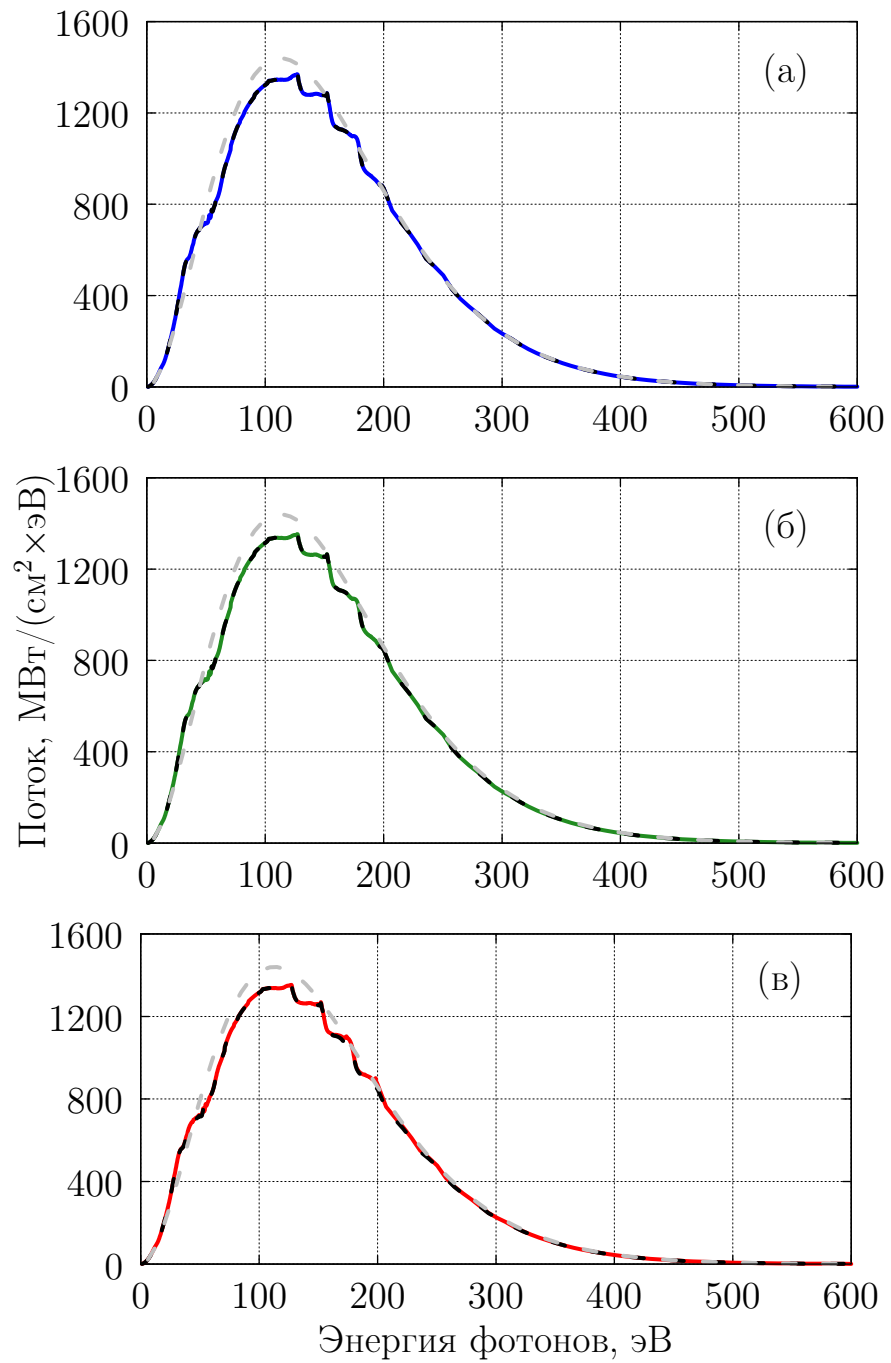


Рис. 3.22. Спектральный поток энергии излучения в случае однородной оптически плотной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы **THERMOS_Layer** и вычисленный по формулам (3.3) (а), (3.4) (б), (3.5) (в) (чёрные кривые), а также поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела (серая кривая)

Далее будем рассматривать неоднородную плазму, для этого зафиксируем следующие значения температуры в подслоях: $T_1 = 100$ эВ, $T_2 = 70$ эВ, $T_3 = 60$ эВ, $T_4 = 40$ эВ, $T_5 = 30$ эВ. Анализ длин пробега фотонов для самой низкой температуры $T = 30$ эВ и самой высокой $T = 100$ эВ позволяет сохранить плотности и размеры слоёв, выбранные ранее для расчётов однородной плазмы. На рисунке 3.23 приведены кривые для спектрального потока энергии излучения в случае неоднородной оптически прозрачной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, рассчитанные по программе `THERMOS_Layer` и вычисленные по формулам (3.10), (3.11), (3.12) (чёрные кривые). На рисунке 3.24 приведены кривые для спектрального потока энергии излучения в случае неоднородной оптически плотной плазмы для бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученные по программе `THERMOS_Layer`, и значения потока, вычисленные по формуле (3.6) (чёрные кривые). Также на графике для сравнения представлен поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела (серая кривая) с температурой $T_{rad} = 30$ эВ, соответствующей температуре поверхности $T_{surf} = T_5 = 30$ эВ.

В результате проведённого сравнительного анализа расчётов неоднородной плазмы и теоретических значений сформулированы выводы, аналогичные сделанным при рассмотрении однородной плазмы. Результаты расчётов совпадают с 99% точностью с теоретическими значениями. В случае ЛТР наблюдается расхождение между рассчитанными значениями потока и функцией $\pi B_\omega(T_{surf})$, которое в интеграле может составлять до 10%. Это обусловлено тем, что используемые при расчёте атомные модели не позволяют добиться идеального выполнения закона Кирхгофа из-за невозможности составления полной системы квантовых состояний ионов и приближённого учёта профиля линий.

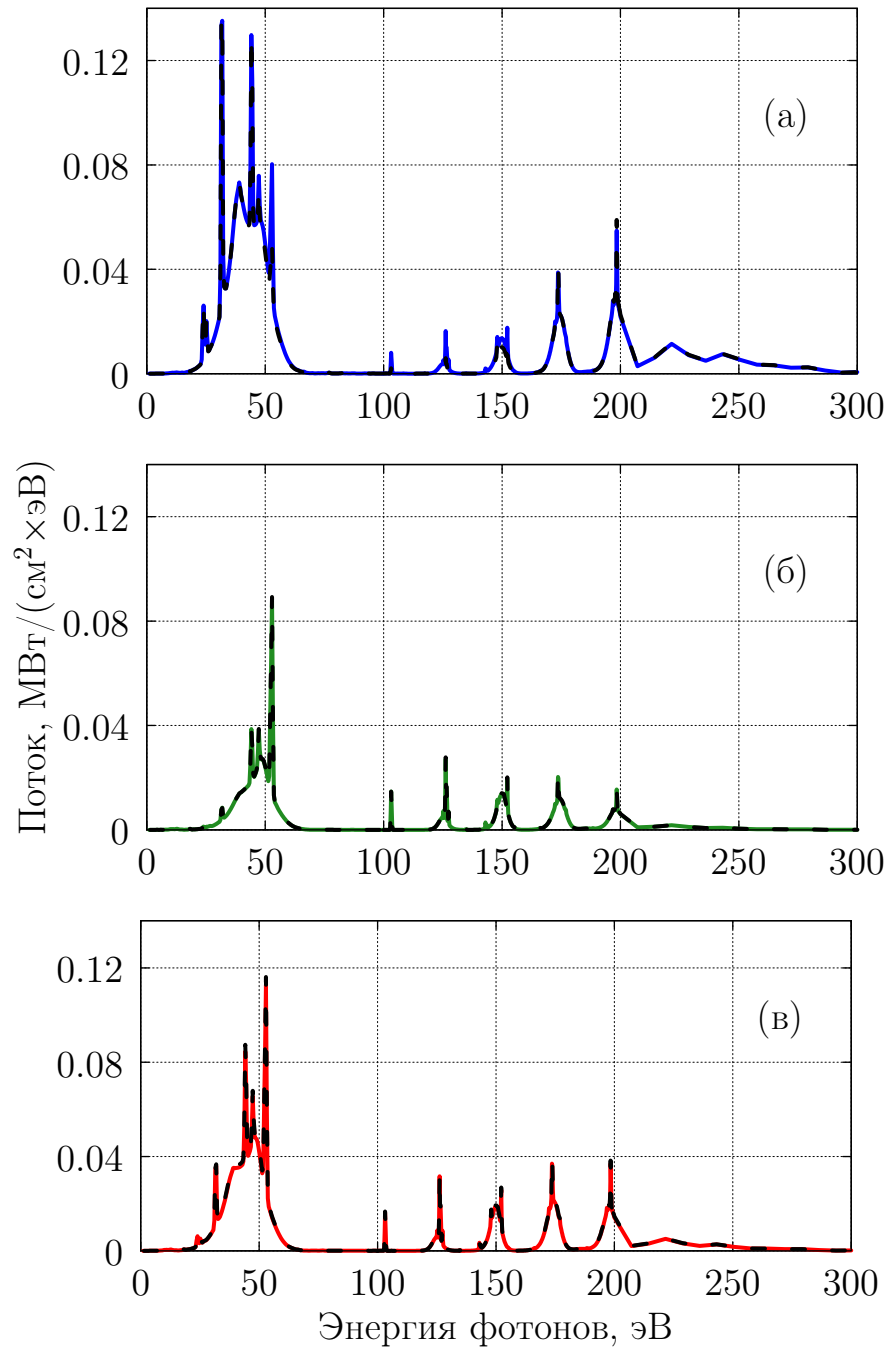


Рис. 3.23. Спектральный поток энергии излучения в случае оптически прозрачной плазмы для неоднородного бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы **THERMOS_Layer** и вычисленный по формулам (3.10) (а), (3.11) (б) и (3.12) (в) (чёрные кривые)

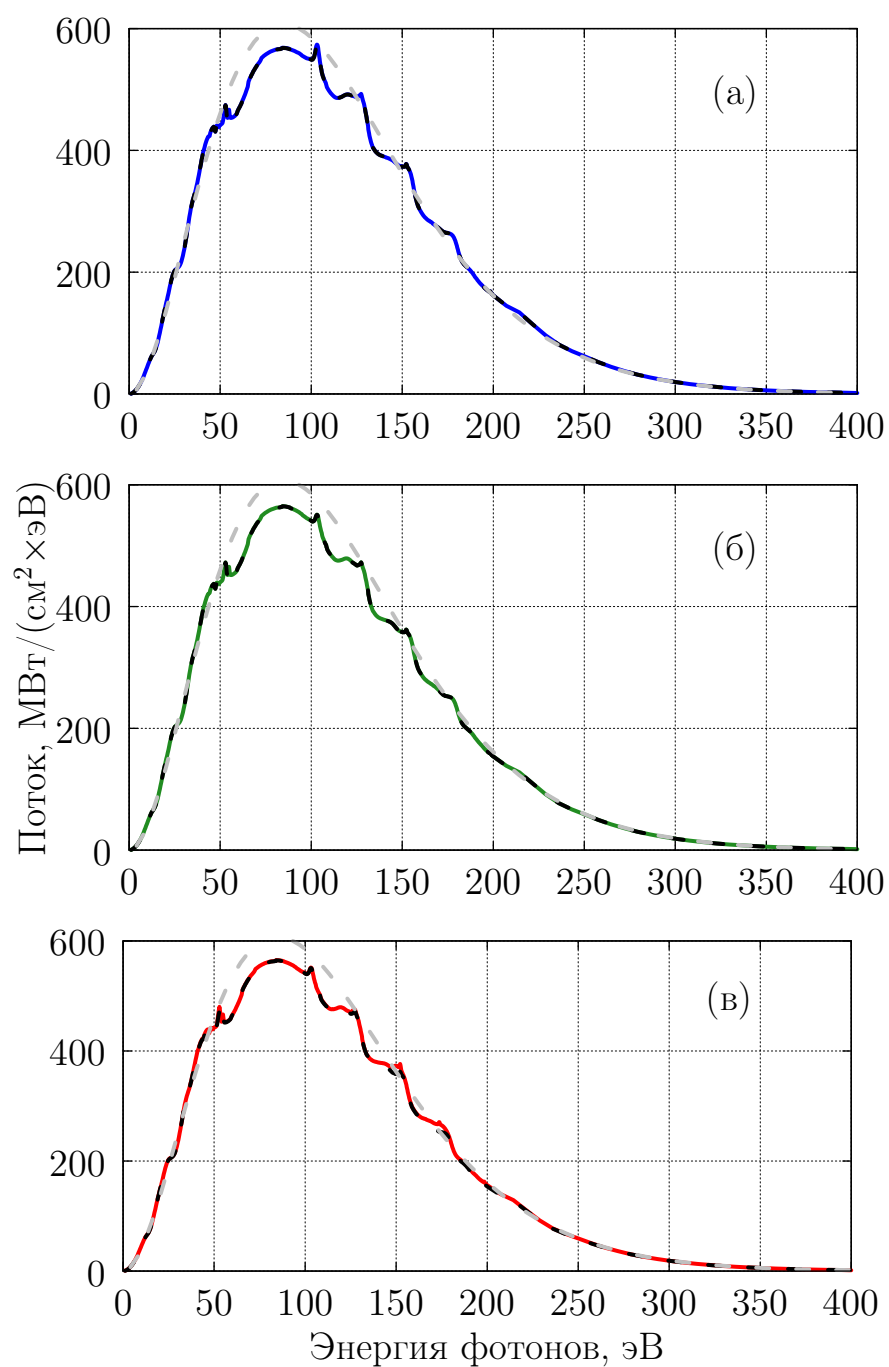


Рис. 3.24. Спектральный поток энергии излучения в случае оптически плотной плазмы для неоднородного бесконечного плоского слоя (а), сферической (б) и цилиндрической (в) геометрий, полученный с помощью программы **THERMOS_Layer** и вычисленный по формуле (3.6) (чёрная кривая), а также поток энергии излучения от абсолютно чёрного тела (серая кривая)

Согласие результатов расчётов по программе **THERMOS_Layer** в пределах 1% погрешности с теоретическими значениями для спектрального потока в двух предельных случаях оптически прозрачной и оптически плотной плазмы при рассмотрении вариантов однородной и неоднородной плазмы позволяет сделать вывод о корректной работе данного кода и его применимости для использования при расчётах свойств излучающей плазмы в трех возможных постановках – сфера, бесконечные плоский слой и цилиндр.

3.4. Коэффициент прохождения через слой кремниевой плазмы

Одной из целей 10-го семинара по неравновесной плазме [52] было решение задачи по моделированию фотоионизованной плазмы кремния в условиях, близких к астрофизическим. В такой плазме из-за наличия интенсивного внешнего поля излучения радиационные процессы преобладают над столкновительными, что ведёт к росту населённости автоионизационных состояний и существенно усиливает роль Оже-переходов.

В рамках семинара для проведения численного эксперимента было предложено провести расчёты однородного слоя кремниевой плазмы, используя разную толщину L (0,1; 0,3; 1,2 см), температуру $T_e = 30$ эВ и два значения плотности электронов n_e (10^{19} ; 3×10^{19} см $^{-3}$). В качестве внешнего источника излучения предлагалось использовать спектр черного тела с температурой излучения $T_{rad} = 63$ эВ и коэффициентом ослабления $K = 1$:

$$B_\omega(K, T_{rad}) = K \frac{15\sigma}{\pi^5} \frac{\omega^3}{\exp(\omega/T_{rad}) - 1}, \quad (3.13)$$

или более сложную комбинацию:

$$B_\omega = B_\omega(0,28; 48) + B_\omega(0,081; 92) + B_\omega(0,0067; 170), \quad (3.14)$$

где ω – энергия фотона в эВ, σ – постоянная Стефана-Больцмана.

Выбор этих случаев для моделирования был обусловлен имеющимися экспериментальными данными по измерению спектров поглощения и излучения фотоионизованной плазмы кремния [144]. Экспериментально измеренный падающий на образец спектральный поток энергии излучения был аппроксимирован комбинацией (3.14) из трех планковских функций: $F_\omega = \pi B_\omega$ (см. рисунок 3.25). Поле излучения вида (3.13) с температурой излучения $T_{rad} = 63$ эВ; $K = 1$ и комбинированное поле (3.14) имеют одинаковый сум-

марный поток энергии, причем у комбинированного поля значительно больше фотонов с большей энергией.

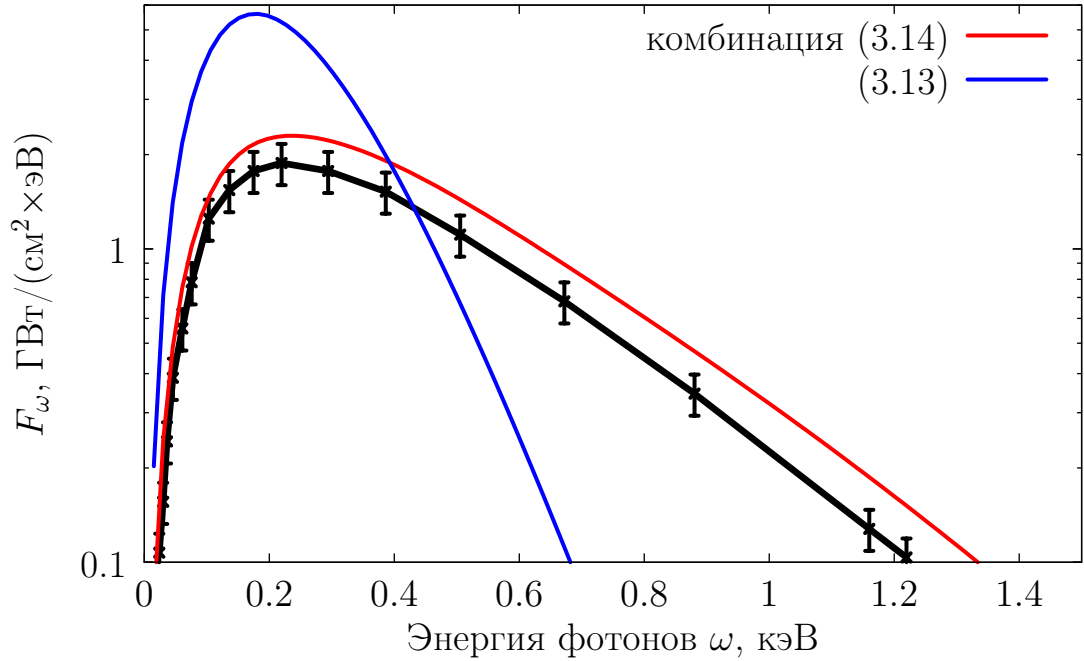


Рис. 3.25. Измеренная спектральная освещенность (черная кривая), её аппроксимация комбинацией трёх планковских функций (красная кривая). Синей кривой обозначен поток энергии излучения чёрного тела с температурой излучения $T_{rad} = 63$ эВ

В результате рассмотрения представленных данных по моделированию, а также их сопоставления с экспериментальными измерениями в предложенный список расчётных случаев был добавлен случай с внешним источником излучения (3.13) и коэффициентом ослабления $K = 0,1$.

Далее для заданного списка случаев требовалось рассчитать: спектральный коэффициент поглощения и поток энергии излучения от плоского слоя, распределение вероятности в зависимости от кратности ионизации, а также средний заряд иона.

Представленные в данном разделе результаты расчётов в основном были получены с помощью программы THERMOS_CRE [86], в которой реализована модель столкновительно-излучательного равновесия для описания плазмы с произвольным полем излучения [59]. Дополнительно в программу была добав-

лена возможность расчёта коэффициента поглощения и излучательной способности, согласованных с собственным полем излучения однородного плоского слоя.

Во время сравнения вычисленных спектров прохождения мягкого рентгеновского излучения через слой фотоионизированной кремниевой плазмы с экспериментально измеренным спектром также использовались результаты расчётов, проведённых с помощью программы **THERMOS_Layer** [87], где в одномерной геометрии реализован поиск согласованного решения уравнения переноса излучения совместно с системой кинетических уравнений [65].

Спектральный коэффициент прохождения определяется из следующего соотношения:

$$T_{\omega} = \prod_{i=1}^N e^{-\tau_i}, \quad (3.15)$$

где N – количество подслоёв (в случае однородного плоского слоя без разбиения на подслои – $N = 1$).

3.4.1. Анализ эксперимента

Из представленного в работе [144] описания экспериментальных данных и проведённого численного исследования можно оценить характерные диапазоны параметров плазмы для их более детального анализа. Согласно проведённым измерениям линейная плотность кремния составила

$3,1 \times 10^{17} \pm 5\% \text{ см}^{-2}$, что в предположении равномерного расширения слоя до 3,5 мм соответствует значению ионной плотности $8,5 \pm 1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Оценка температуры проводилась по соотношению спектральных линий поглощения основного $1s^2 2s$ и возбуждённого $1s^2 2p$ состояний Li-подобного иона Si^{11+} и составила $T_e = 33 \pm 7 \text{ эВ}$. Измеренный спектр поглощения соответствовал распределению зарядового состава с пиком около Be-подобного иона Si^{10+} , в то время как в измеренном спектре излучения преобладал Li-подобный ион

Si^{11+} . Стоит отметить, что при этих параметрах используемые для анализа в работе [144] модели показали преобладание He-подобного иона Si^{12+} . Чтобы достигнуть наилучшего согласия с измеренным спектром, потребовалось снизить температуру, а для усиления влияния процессов столкновительной рекомбинации – немного повысить электронную плотность.

Проведём предварительный анализ определённых организаторами параметров плазмы кремния. Первым шагом проведём расчёт изотерм среднего заряда иона для плазмы кремния по программе THERMOS_CRE при температуре электронов $T_e = 30$ эВ, температурах излучения $T_{rad} = 0$ и 63 эВ и заданных коэффициентах ослабления $K = 0,1$ и 1, но без учёта размера плазмы. Полученные результаты представлены на рисунке 3.26 (а).

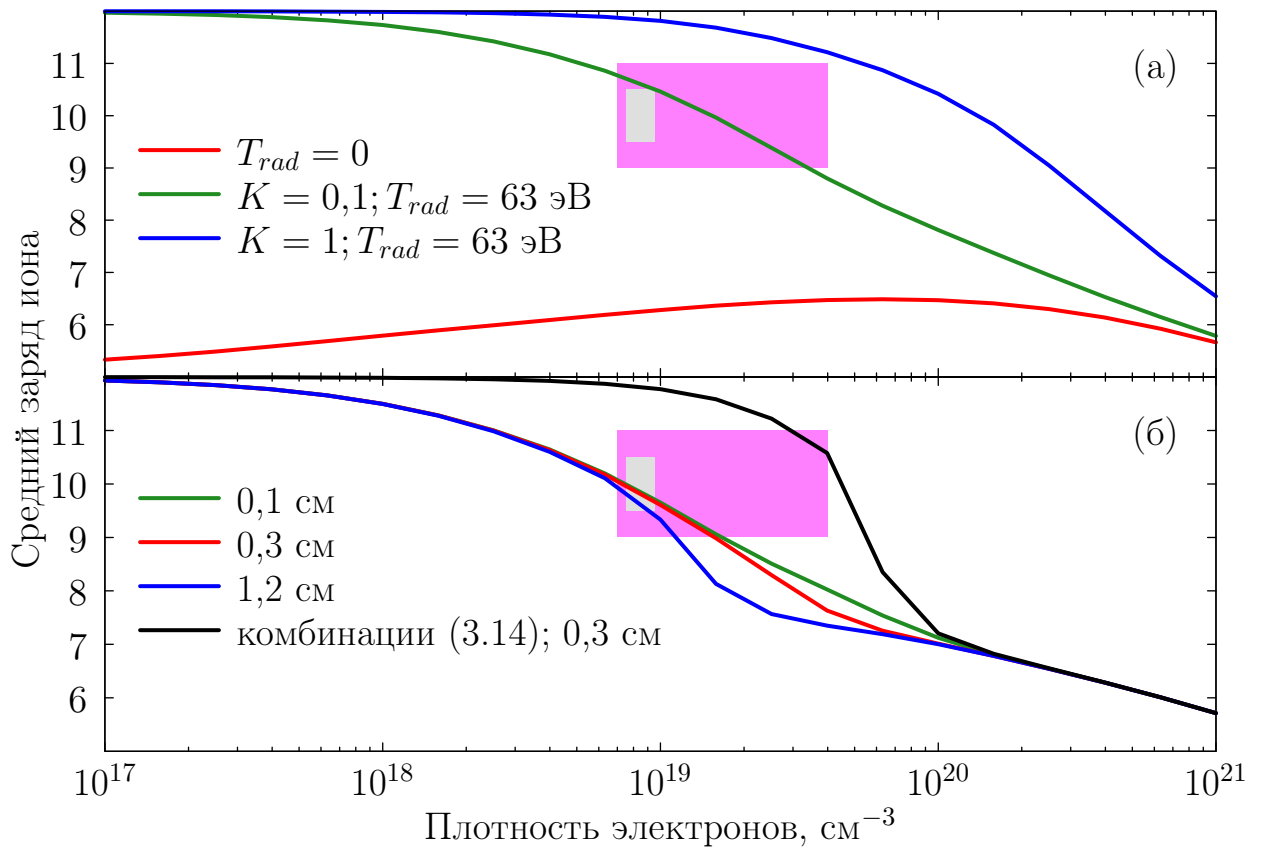


Рис. 3.26. Изотермы среднего заряда иона при температуре электронов $T_e = 30$ эВ в случае фотоионизованной и прозрачной плазмы кремния: (а) – без учёта размера плазмы, (б) – при параметрах $K = 0,1; T_{rad} = 63$ эВ и комбинации планковских функций (3.14) с учётом размера плазмы

Прямоугольником серого цвета обозначена область характерных параметров плазмы кремния, определённая в результате анализа экспериментальных данных, а розовым – на основе проведённых в работе [144] исследований. Из рисунка 3.26 (а) видно, что зелёная кривая, соответствующая расчёту с полем излучения (3.13) и коэффициентом ослабления $K = 0,1$, проходит через область характерных параметров. В качестве второго шага рассмотрим, как учёт собственного поля излучения слоя влияет на поведение среднего заряда иона в зависимости от плотности. На рисунке 3.26 (б) приведены изотермы среднего заряда иона в фотоионизированной плазме кремния ($T_{rad} = 63$ эВ и $K = 0,1$) при разных толщинах плоского слоя ($L = 0,1; 0,3$ и $1,2$ см). Все рассчитанные кривые проходят через серую область характерных параметров. Также на рисунок (б) нанесена зависимость, соответствующая расчёту с комбинированным полем излучения (3.14) и толщиной слоя $0,3$ см. Данная кривая лежит на границе области розового цвета и соответствует более высоким значениям среднего заряда, что не позволит достичь хорошего согласия с экспериментальным спектром прохождения.

Далее проведём сравнение результатов расчётов распределения вероятности $P_k = \sum_s x_{ks}$ в зависимости от кратности ионизации в слое плазмы кремния толщиной $0,3$ см с внешним источником излучения трех видов: (3.13) с $K = 0,1; 1$ и комбинированного (3.14) – для двух фиксированных плотностей электронов $n_e = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и $3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ с результатами других участников семинара [52].

На рисунке 3.27 результаты расчётов по программе THERMOS_CRE, полученные при плотности электронов 10^{19} см^{-3} и $3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, нанесены кривыми синего и чёрного цвета соответственно. Результаты участников семинара приведены в обезличенной форме (см. кривые голубого и серого цветов). Для всех трёх видов поля излучения более высокая плотность электронов приво-

дит к более низким зарядовым состояниям. Из рисунка видно хорошее согласие результатов расчёта по программе THERMOS_CRE с результатами других участников семинара. Наилучшее согласие рассчитанных коэффициентов поглощения и излучательной способности с экспериментальными данными [144] было получено по коду ATOMIC при температуре $T_e = 25$ эВ и плотности электронов $n_e = 1,7 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Соответствующее распределение вероятности в зависимости от кратности ионизации приведено на рисунке 3.27 штриховой кривой красного цвета.

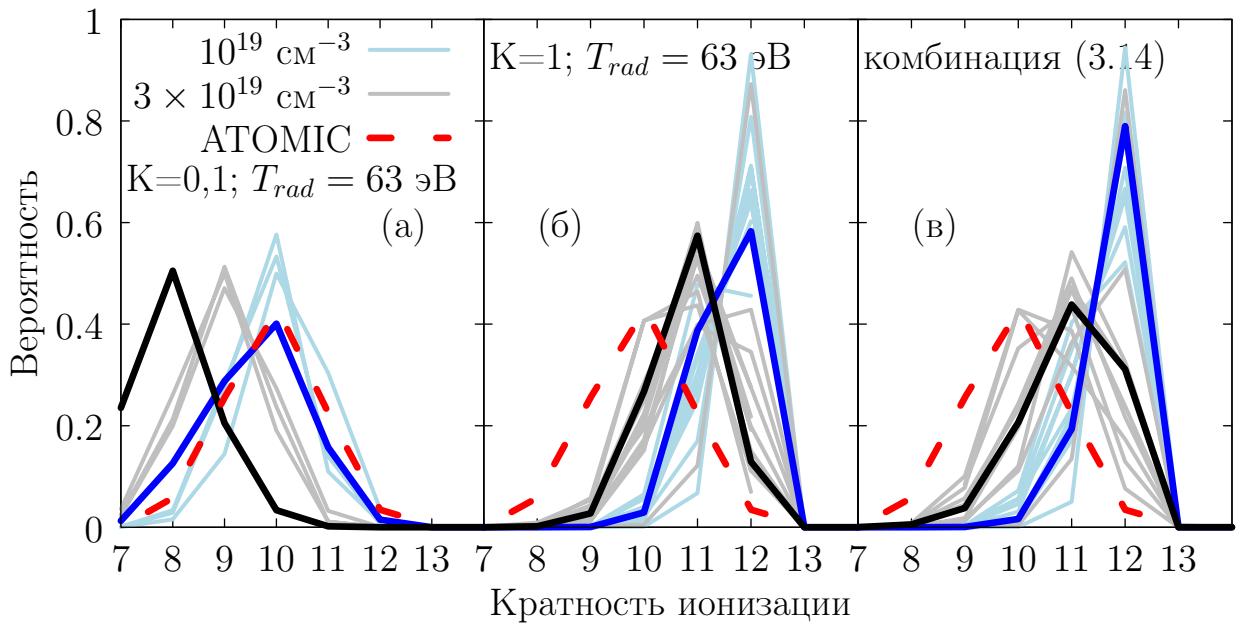


Рис. 3.27. Распределение вероятности P_k в зависимости от кратности ионизации для слоя кремниевой плазмы толщиной $L = 0,3$ см с температурой 30 эВ, двух плотностей 10^{19} см^{-3} и $3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$, а также трёх видов внешнего поля излучения в сравнении с результатами участников семинара. Красными штрихами обозначено распределение, полученное по коду ATOMIC при температуре $T_e = 25$ эВ и плотности электронов $n_e = 1,7 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$

Несмотря на то что большинство моделей предсказывают схожее распределение вероятности в зависимости от кратности ионизации, существует значительный разброс в деталях распределения. Модели показывают увеличение ионизации примерно на 2 зарядовых состояния при переходе от поля излучения (3.13) с коэффициентом ослабления $K = 0,1$ к полю с $K = 1$ или

комбинированному внешнему полю (3.14). При условиях, наиболее близких к экспериментально полученным параметрам ($T_e = 33$ эВ, $n_e = 8,5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$), ни одна из моделей не имеет распределения зарядового состояния (см. рисунки 3.27 (б) и (в)), которое привело бы к возникновению в спектрах поглощения доминирующего Ве-подобного иона Si^{10+} . Увеличение плотности примерно в 3,5 раза по сравнению с экспериментальным значением не привело к получению распределения вероятности по зарядовым состояниям, которое близко к соответствующему экспериментальному спектру поглощения. Стоит отметить, что результаты большинства кодов для электронной плотности $n_e = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ с полем излучения (3.13) и коэффициентом ослабления $K = 0,1$ примерно соответствуют измеренному распределению по зарядовым состояниям (см. рисунок 3.27 (а)).

На основе проведённого сравнительного анализа и сопоставления с экспериментальными условиями можно сделать вывод, что при следующих параметрах плазмы кремния ($T_e = 30$ эВ; $n_e = 10^{19} \text{ см}^{-3}$; $K = 0,1$; $T_{rad} = 63$ эВ; $L = 0,35$ см) стоит ожидать удовлетворительного согласия расчётного спектра прохождения с экспериментально измеренным.

3.4.2. Анализ спектра прохождения

Проведём расчёт спектра прохождения по формуле (3.15) для приведённых выше параметров однородного плоского слоя плазмы кремния (количество подслоёв $N = 1$). Полученный спектр прохождения мягкого рентгеновского излучения через слой фотоионизированной плазмы кремния толщиной 0,35 см приведён на рисунке 3.28 (а) (зелёная кривая) в сравнении с экспериментально измеренным (чёрная кривая). Как и ожидалось, при параметрах плазмы ($T_e = 30$ эВ; $n_e = 10^{19} \text{ см}^{-3}$; $K = 0,1$; $T_{rad} = 63$ эВ; $L = 0,35$ см) расчётный спектр прохождения хорошо согласуется с экспериментальным. Отли-

чие спектров в интеграле не превышает 1%. На рисунке 3.28 (б) представлен вклад ионов различной кратности в спектр, полученный для однородного слоя ($N = 1$).

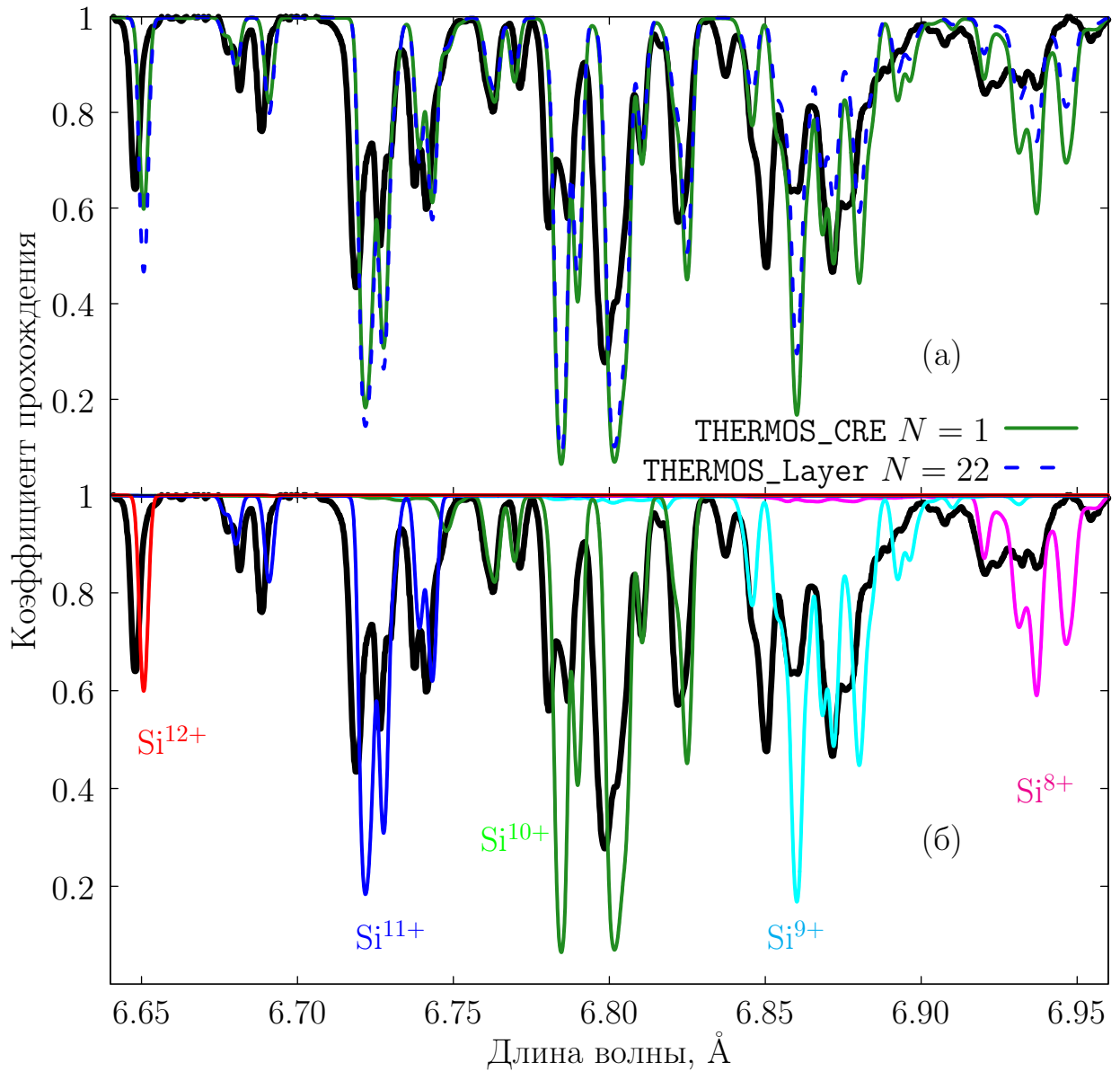


Рис. 3.28. Спектр прохождения мягкого рентгеновского излучения через слой кремниевой плазмы толщиной $L = 0,35$ см при температуре электронов 30 эВ, электронной плотности 10^{19} см⁻³ и поля излучения (3.13) с коэффициентом ослабления 0,1 и температурой излучения 63 эВ в сравнении с экспериментальными данными из работы [144]. В многослойном варианте расчёта задавалась ионная плотность $n_i = 8,5 \times 10^{17}$ см⁻³

В дополнение к представленным результатам были проведены расчёты

по программе **THERMOS_Layer**, где в одномерной геометрии реализовано согласованное решение уравнения переноса излучения с системой кинетических уравнений [65]. Отличие используемой модели заключается в том, что слой плазмы толщиной L разбивается на N подслоёв ($z_{i-1} < z < z_i$; $i = 1, N$; $z_0 = 0$; $z_N = L$). Вместо электронной плотности при вычислениях задаётся ионная плотность для сохранения общего количества частиц. В каждом подслое плотность ионов и температура электронов остаются фиксированными, т.е. $n_i = 8,5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $T_e = 30 \text{ эВ}$. При этом плотность энергии излучения $U_\omega = \frac{1}{c} \int_{4\pi} I_\omega d\Omega$ предполагается постоянной внутри каждого подслоя, но в отличие от n_i и T_e в процессе итераций согласования она может изменяться от слоя к слою. Рассчитанный по формуле (3.15) спектр прохождения для многослойного варианта ($N = 22$) представлен на рисунке 3.28 (а) (синяя пунктирная кривая). Для многослойного варианта заметны небольшие отклонения спектра от однослойного, что вызвано перераспределением вклада от ионов различной кратности с каждого из подслоёв (см. рисунок 3.29), где кривыми светло-синего цвета нанесены распределения вероятности для каждого из подслоёв, а кривой синего цвета – с крайнего слоя (z_N). Отклонения в положениях и силах отдельных спектральных линий от экспериментально измеренных объясняются использованием в комплексе программ **THERMOS** нерелятивистских конфигураций $Q_{ks} = \{N_{n\ell}^{ks}\}$ ($n\ell$ – главное и орбитальное квантовые числа) при решении кинетической системы (1.9). Отличие рассчитанного спектра прохождения от экспериментально измеренного также связано с рассмотрением полностью однородного по температуре и плотности слоя плазмы, что сложно реализуемо в лабораторных условиях.

На основе представленных на рисунке 3.28 (а) результатов можно заключить, что спектр прохождения в многослойном варианте расчёта даёт чуть лучшее согласие с экспериментом, чем в однослойном, потому что неоднородность поля излучения вдоль оси z учитывается более аккуратно.

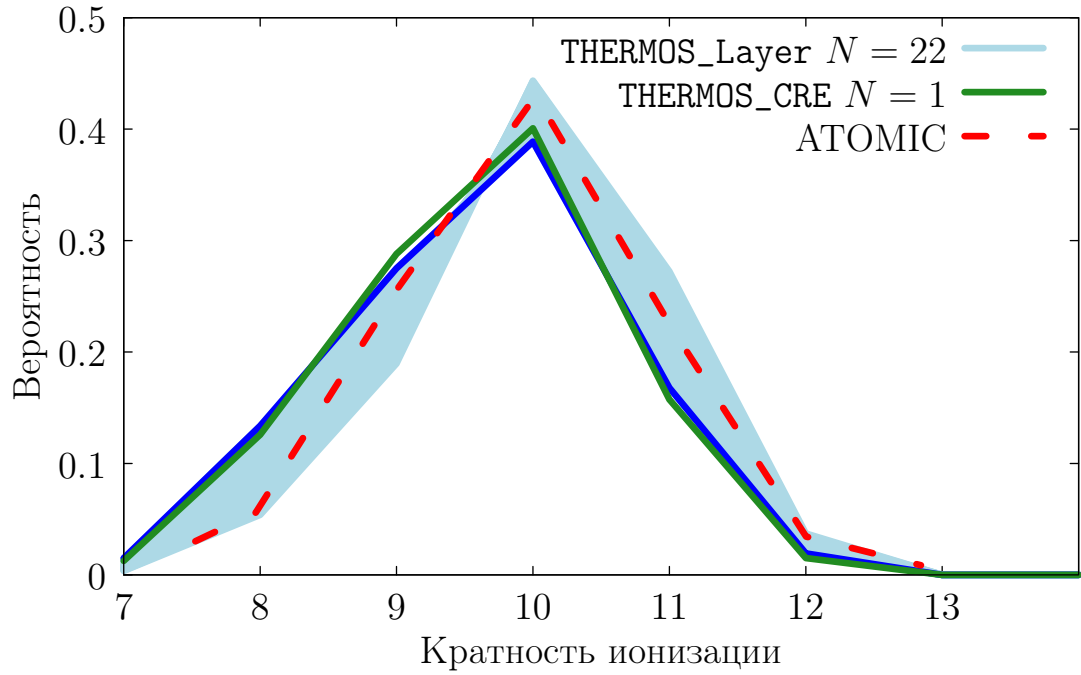


Рис. 3.29. Распределение вероятности в зависимости от кратности ионизации для слоя кремниевой плазмы толщиной $L = 0,35$ см, с температурой $T_e = 30$ эВ и полем излучения (3.13) с коэффициентом ослабления 0,1 и температурой излучения 63 эВ. Красными штрихами обозначено распределение, при котором получено наилучшее согласие с экспериментальными данными по спектру прохождения [144]

На рисунке 3.30 представлены зависимости распределения среднего заряда иона от положения внутри слоя плазмы кремния толщиной $L = 0,35$ см в присутствии внешнего источника излучения вида (3.13) с температурой излучения 63 эВ и коэффициентом ослабления 0,1. Значения среднего заряда иона рассчитывались для однородного по температуре и плотности слоя. При этом в случае однослойного ($N = 1$) задавалась фиксированной электронной плотность 10^{19} см^{-3} , а многослойного ($N = 22$) – ионная плотность $8,5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. В случае многослойного расчёта значение среднего заряда иона падает от значения 10,04 на левой границе слоя до 9,62 на правой, а в однослойном варианте значение среднего заряда постоянно по толщине и составляет 9,61. Также на рисунок добавлено значение среднего заряда иона, рассчитанное по коду ATOMIC, которое составляет 9,9.

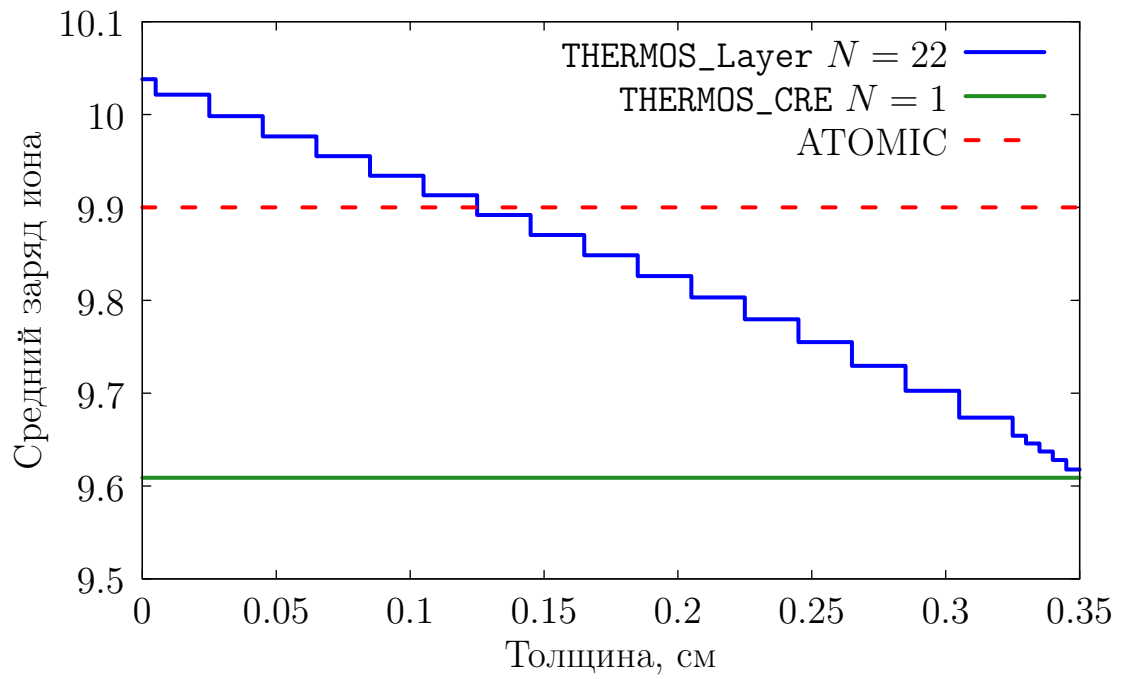


Рис. 3.30. Зависимость среднего заряда иона от координаты z в плоском слое плазмы кремния толщиной L

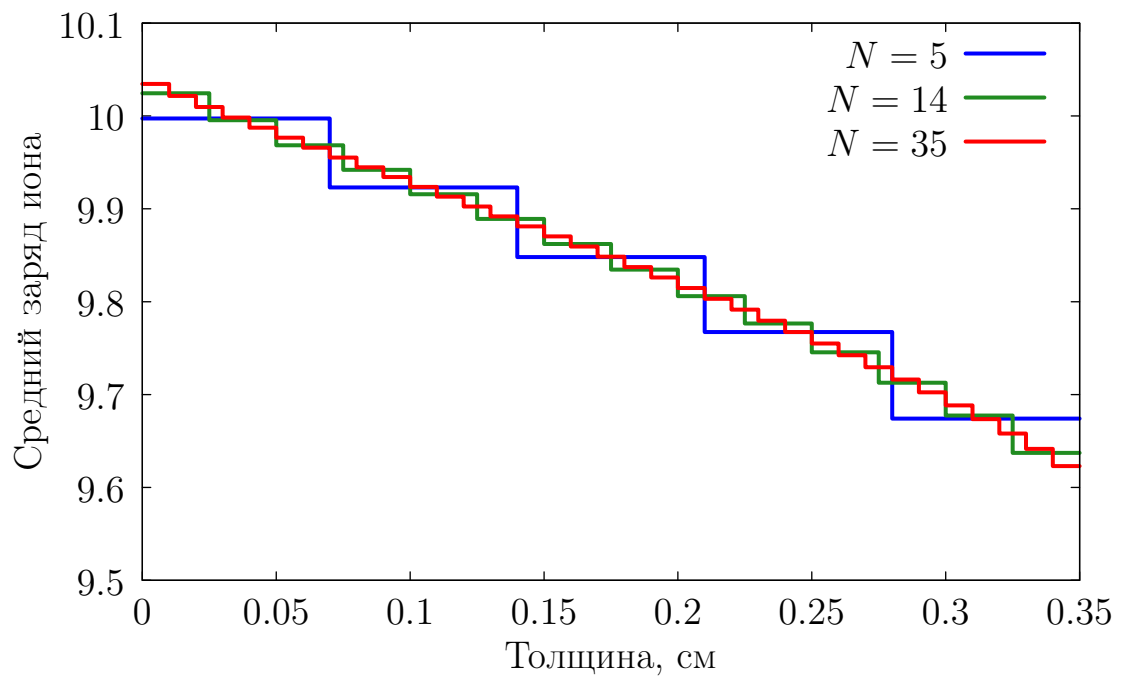


Рис. 3.31. Зависимость среднего заряда иона от координаты z в плоском слое плазмы кремния толщиной L при различном количестве подслоёв $N = 5; 14$ и 35

Дополнительно было проведено исследование сходимости решения по величине среднего заряда в зависимости от разного количества подслоёв. На

рисунке 3.31 представлены рассчитанные зависимости распределения значений среднего заряда иона от координаты внутри слоя плазмы кремния толщиной $L = 0,35$ см и равномерного разбиения на $N = 5; 14$ и 35 подслоёв ($\Delta z = 0,07; 0,025$ и $0,01$ см). На основе полученных результатов можно сделать вывод, что сходимость по распределению среднего заряда иона вдоль оси z достигается уже для $N = 14$ при равномерном разбиении на подслои. Стоит отметить, что при неравномерном разбиении на подслои, а именно сгущении подслоёв к границам плоского слоя ($z_0 = 0$ и $z_N = L$), можно добиться сходимости и при меньшем количестве подслоёв (ср. рисунки 3.30 и 3.31).

Различное разбиение на подслои ($N \geq 5$) в рассматриваемом диапазоне длин волн не оказывает существенного влияния на расчётный спектр прохождения, так как длина свободного пробега фотонов $l = \kappa^{-1}$ превышает размер подслоёв (см. рисунок 3.32). Таким образом, при выбранных параметрах плазма является оптически прозрачной, поэтому спектральный поток энергии излучения определяется по формуле $F_\omega = 2\pi j_\omega L$. Из этого следует, что для лучшего соответствия с экспериментом нужно либо уменьшить размеры слоя, либо понизить плотность. На рисунке 3.33 представлен спектр прохождения мягкого рентгеновского излучения через слой кремниевой плазмы толщиной $L = 0,2$ см при температуре электронов 30 эВ, электронной плотности 10^{19} см $^{-3}$ и поля излучения (3.13) с коэффициентом ослабления 0,1 и температурой излучения 63 эВ в сравнении с экспериментальными данными из работы [144]. Как видно из рисунка, уменьшение размера слоя привело к тому, что массивы спектральных линий, соответствующие ионам Si^{10+} , Si^{11+} и Si^{12+} , стали лучше соответствовать экспериментальному спектру прохождения.

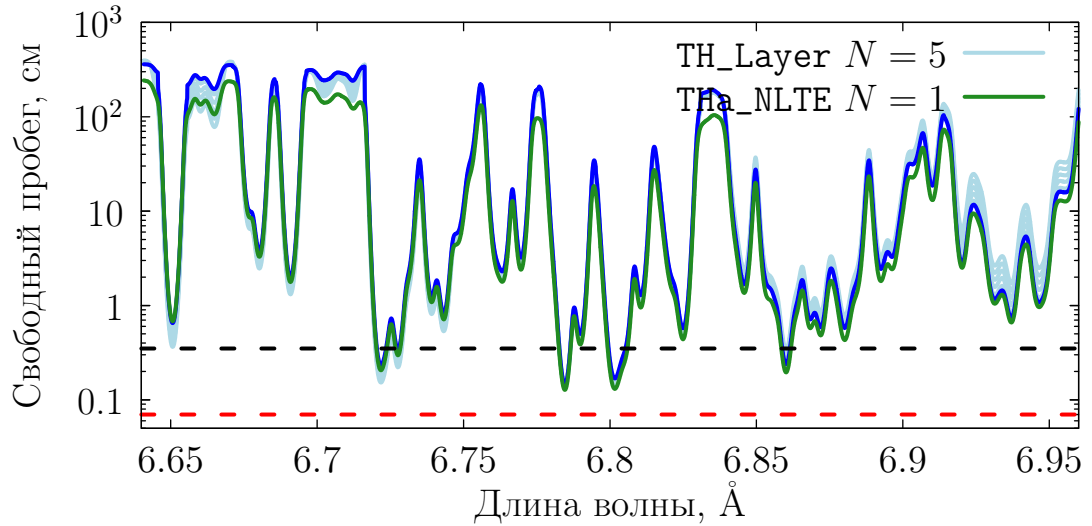


Рис. 3.32. Свободный пробег фотонов в плазме кремния при температуре электронов 30 эВ, электронной плотности 10^{19} см^{-3} и поля излучения (3.13) с коэффициентом ослабления 0,1 и температурой излучения 63 эВ. В многослойном варианте расчёта задавалась ионная плотность $n_i = 8,5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Пунктирными линиями нанесены значения толщин: $L = 0,35 \text{ см}$ для $N = 1$ (чёрная линия), $\Delta z = 0,07 \text{ см}$ для $N = 5$ (красная линия)

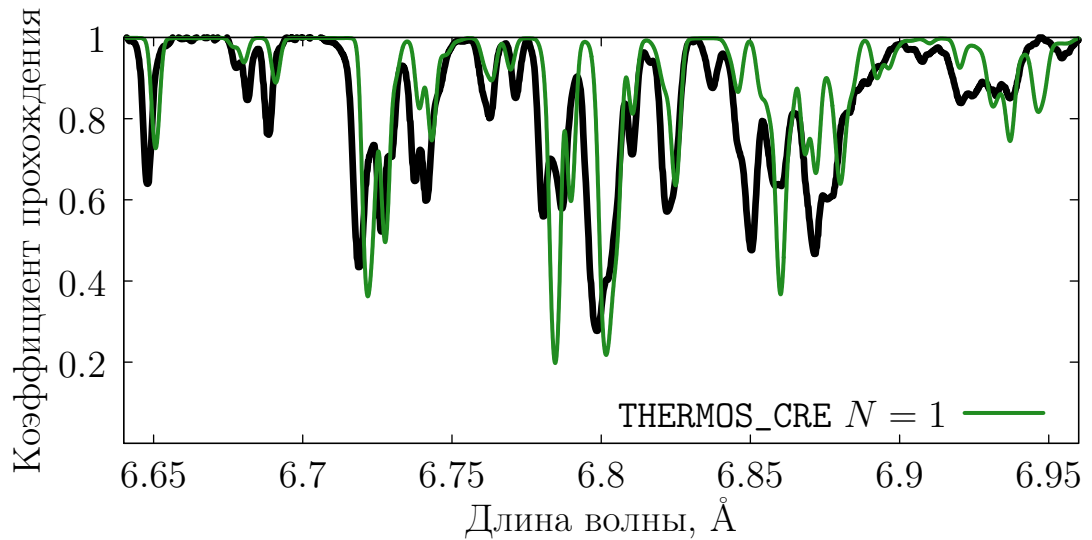


Рис. 3.33. Спектр прохождения мягкого рентгеновского излучения через слой кремниевой плазмы толщиной $L = 0,2 \text{ см}$ при $T_e = 30 \text{ эВ}$, $n_e = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и поля излучения (3.13) с $K = 0,1$ и $T_{rad} = 63 \text{ эВ}$ в сравнении с экспериментальными данными из работы [144]

3.5. Выводы к третьей главе

Таким образом, в рамках данной главы представлены результаты исследований используемых моделей и приближений, а также проведена верификация программ, разработанных на их основе, путём сравнения результатов расчётов с экспериментальными данными, аналитическими решениями и с результатами расчётов по независимым программам других авторов.

Проведено исследование моделей Стюарта-Пятта или Экера-Кролла, применяемых для оценки величины снижения потенциалов ионизации в зависимости от плотности вещества. Реализация этих приближений в программах комплекса THERMOS позволила значительно расширить область применимости модели столкновительно-излучательного равновесия для плотностей вещества выше $0,01 \text{ г/см}^3$, что продемонстрировано на примерах расчётов для плазмы алюминия и железа.

Проведено исследование влияния наличия горячих электронов с относительно малой концентрацией ($\sim 1\text{--}10 \%$) на ионизационный состав плазмы. На примере расчётов плазмы ванадия показано, что наличие небольшой доли горячих электронов приводит к заметному изменению ионизационного состояния. Возможность учёта горячих электронов в расчётах позволила расширить класс задач, для решения которых может быть использован данный комплекс программ.

Верификация согласованного решения уравнения переноса в одномерной геометрии с системой кинетических уравнений проведена на основе сравнения результатов расчётов с аналитическими решениями в предельных случаях оптически прозрачной и плотной плазмы. Получено согласие результатов в пределах 1% погрешности.

Выполнено моделирование эксперимента [144], где был измерен спектр прохождения мягкого рентгеновского излучения через слой фотоионизован-

ной кремниевой плазмы. В рамках рассматриваемой модели получено качественное и количественное согласие рассчитанного спектра прохождения с экспериментально измеренным. Расхождение расчётного и измеренного спектра в интеграле не превышает 1 %.

Результаты проведённых исследований показали, что модель столкновительно-излучательного равновесия и программы, разработанные на её основе, позволяют с хорошей точностью моделировать радиационные свойства плазмы в условиях как локального термодинамического равновесия, так и с произвольным полем излучения. При этом область применимости лежит в диапазоне от 10^{-9} до 10^4 г/см³ для плотности вещества и в диапазоне от 10^{-3} до 10 кэВ для электронной температуры.

Заключение

В ходе выполнения диссертационной работы получены следующие результаты:

1. Сформулирована усовершенствованная модель столкновительно-излучательного равновесия для расчёта термодинамических и радиационных свойств плазмы с произвольным полем излучения и возможностью учёта эффектов плотности по моделям снижения потенциалов ионизации Стюарта-Пьятта и Экера-Кролла, и учёта относительно малой доли горячих электронов с температурой много больше, чем температура плазмы. На основе построенной модели разработана программа **THERMOS_CRE**.

Программа рекомендуется к применению в случаях, когда требуются широкодиапазонные таблицы по радиационным и термодинамическим свойствам веществ в условиях локального термодинамического равновесия или с произвольным полем излучения. Для ускорения расчёта таблиц реализован параллельный запуск задач на ЭВМ для фиксированных точек по температуре и плотности с помощью отдельных MPI-процессов. В настоящее время результаты, полученные по разработанной программе **THERMOS_CRE**, активно используются при решении практических задач радиационной газовой динамики и физики плазмы [66, 68, 136, 137].

2. Получены согласованные решения уравнения переноса излучения с системой кинетических уравнений в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия для одномерных модельных систем различного типа симметрии – плоской, цилиндрической, сферической. На основе полученных решений разработан программный модуль **THERMOS_Layer**, позволяющий рассчитывать свойства плазмы с учётом эффектов непрозрачности при конечных размерах. Расчёт возможен не только в последовательном, но и в параллельном режиме. Вычисление радиационных характеристик

плазмы на подслоях производится посредством запуска отдельных MPI-процессов, при этом плотность энергии излучения и поток рассчитываются на мастер-процессоре. С помощью итерационного процесса проводится поиск согласованного решения, а итерации продолжаются до тех пор, пока не будет достигнута сходимость по величине радиационных потерь.

3. Разработаны алгоритмы для расчёта оптических и термодинамических характеристик веществ в рамках усовершенствованной модели столкновительно-излучательного равновесия с произвольным полем излучения, а также алгоритм согласования с кинетикой решений уравнения переноса излучения в одномерной геометрии для модельных систем различного типа симметрии.

4. Проведено исследование моделей и верификация разработанных программ THERMOS_CRE и THERMOS_Layer путём сравнительного анализа полученных результатов с экспериментальными данными, с аналитическими решениями и с результатами других программ, участвующих в международных семинарах по сравнению неравновесных кодов. Проведённая верификация подтвердила высокое качественное и количественное совпадение результатов.

Программы THERMOS_CRE и THERMOS_Layer вошли в состав вычислительного комплекса программ THERMOS, разрабатываемого в ИПИМ им. М.В. Келдыша РАН.

Результаты проведённых исследований показали, что модель столкновительно-излучательного равновесия и программы, разработанные на её основе, позволяют с хорошей точностью моделировать радиационные свойства плазмы в условиях как локального термодинамического равновесия, так и с произвольным полем излучения. При этом область применимости лежит в диапазоне от 10^{-9} до 10^4 г/см³ для плотности вещества и в диапазоне от 10^{-3} до 10 кэВ для электронной температуры.

В заключении стоит отметить, что все поставленные диссертантом зада-

чи решены в процессе проведения исследования: выполнено развитие математических моделей, проведена разработка методов и алгоритмов и осуществлена их реализация на языке программирования FORTRAN в виде конкретных компьютерных программ – THERMOS_CRE и THERMOS_Layer, которые позволяют выполнять серийные расчёты термодинамических и радиационных свойств излучающей плазмы с учётом эффектов неравновесности на современных высокопроизводительных ЭВМ с параллельной архитектурой. Таким образом, достигнута поставленная цель диссертационной работы.

В качестве перспективы для дальнейшего развития комплекса программ THERMOS стоит рассмотреть возможность использования более точных приближений для расчёта скоростей процессов – например, приближение искажённых волн [145, 18, 146, 147] для скоростей столкновительных процессов или использование заранее рассчитанных сечений процессов с помощью сторонних кодов атомной физики – например, кода FAC [24].

Список литературы

1. Bakshi V. EUV Sources for Lithography / Ed. by V. Bakshi. SPIE Press Monographs. 1000 20th Street, Bellingham, WA 98227-0010 USA: SPIE, 2006. ISBN: 9780819458452.
2. Bakshi V. EUV Lithography (SPIE Press Monograph Vol. PM178). SPIE Publications, 2008. ISBN: 0819469645, 9780819469649.
3. EUV Lithography, Second Edition / Ed. by V. Bakshi. SPIE, 2018. ISBN: 9781510616783.
4. Рыжков С.В., Чирков А.Ю. Системы альтернативной термоядерной энергетики. М.: Физматлит, 2017. С. 200.
5. Ryzhkov S.V., Chirkov A.Yu. Alternative Fusion Fuels and Systems. 2018. ISBN: 9780429399398.
6. Le Pape S., Berzak Hopkins L.F., Divol L. et al. Fusion Energy Output Greater than the Kinetic Energy of an Imploding Shell at the National Ignition Facility // Physical Review Letters. 2018. Vol. 120, no. 24.
7. Kirillov G.A., Garanin S.G., Kochemasov G.G. et al. Development of laser fusion investigations at All-Russian Scientific Research Institute of Experimental Physics (VNIIEF) // Laser and Particle Beams. 1999. Vol. 17, no. 3. P. 487–498.
8. Gibbs W.W. Triple-threat method sparks hope for fusion. 2014. Vol. 505, no. 7481. P. 9–10.
9. Альбиков З.А., Велихов Е.П., Веретенников А.И. и др. Импульсный термоядерный комплекс «Ангара-5-1» // Атомная энергия. 1990. Т. 68, № 1. С. 26–35.
10. Волков Г.С., Грабовский Е.В., Зайцев В.И. и др. // ПТЭ. 2004. № 2.

С. 74.

11. Bates D.R., Kingston A.E., McWhirter R.W.P. Recombination Between Electrons and Atomic Ions. I. Optically Thin Plasmas // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1962. Vol. 267, no. 1330. P. 297–312.
12. Bates D.R., Kingston A.E., McWhirter R.W.P. Recombination between Electrons and Atomic Ions. II. Optically Thick Plasmas // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1962. Vol. 270, no. 1341. P. 155–167.
13. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика ударно-радиационной ионизации и рекомбинации // Усп. физ. наук. 1972. Т. 107, № 7. С. 353–387.
14. Беляев С.Т., Будкер Г.И. Многоквантовая рекомбинация в ионизованном газе // Физика плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций. Изд-во АН СССР, 1958. С. 41–49.
15. Питаевский Л.П. // ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 1326.
16. Гуревич А.В., Питаевский Л.П. // ЖЭТФ. 1964. Т. 46. С. 1281.
17. Гуревич А.В. // Геомагн. и аэроном. 1964. Т. 4. С. 3.
18. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
19. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, 1982. Т. Часть I. С. 352.
20. Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas / Ed. by Y. Ralchenko. Cham: Springer International Publishing, 2016. Vol. 90 of Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. ISBN: 978-3-319-27512-3.
21. Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. М.: ИЛ, 1949. С. 440.

22. Cowan R.D. The theory of atomic structure and spectra / Ed. by R. Cowan. 1981.
23. Kilcrease D.P., Abdallah J., Keady J.J., Clark R.E.H. Atomic configuration average simulations for plasma spectroscopy // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1993. Vol. 26, no. 20. P. L717–L723.
24. Gu M.F. The flexible atomic code // Canadian Journal of Physics. 2008. Vol. 86, no 5. P. 675–689.
25. Bar-Shalom A., Klapisch M., Oreg J. HULLAC, an integrated computer package for atomic processes in plasmas // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2001. Vol. 71, no. 2-6. P. 169–188.
26. Mazevet S., Abdallah J. Mixed UTA and detailed line treatment for mid-Z opacity and spectral calculations // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2006. Vol. 39, no. 16. P. 3419–3429.
27. Fontes C.J., Zhang H.L., J. Abdallah et al. The Los Alamos suite of relativistic atomic physics codes // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2015. Vol. 48, no. 14. P. 144014.
28. Bauche-Arnoult C., Bauche J., Klapisch M. Variance of the distributions of energy levels and of the transition arrays in atomic spectra // Phys. Rev. A. 1979. Vol. 20, no. 6. P. 2424–2439.
29. Bauche J., Bauche-Arnoult C., Wyart J.-F. et al. Simulation of atomic transition arrays for opacity calculations // Phys. Rev. A. 1991. Vol. 44, no. 9. P. 5707–5714.
30. Duffy P., Klapisch M., Bauche J., Bauche-Arnoult C. Monte Carlo simulation of complex spectra for opacity calculations // Physical Review A. 1991. Vol. 44, no. 9. P. 5715–5724.
31. Bauche J., Bauche-Arnoult C. Recent progress in the global description of

- atomic transitions // *Physica Scripta T*. 1996. Vol. 65, no. T65. P. 99–103.
32. Bar-Shalom A., Oreg J., Goldstein W. H. et al. Super-transition-arrays: A model for the spectral analysis of hot, dense plasma // *Physical Review A*. 1989. Vol. 40, no. 6. P. 3183–3193.
 33. Chung H.K., Chen M.H., Morgan W.L. et al. FLYCHK: Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements // *High Energy Density Physics*. 2005. Vol. 1, no. 1. P. 3–12.
 34. Chung H.K., Chen M.H., Lee R.W. Extension of atomic configuration sets of the Non-LTE model in the application to the $K\alpha$ diagnostics of hot dense matter // *High Energy Density Physics*. 2007. Vol. 3, no. 1-2. P. 57–64.
 35. Scott H.A., Hansen S.B. Advances in NLTE modeling for integrated simulations // *High Energy Density Physics*. 2010. Vol. 6, no. 1. P. 39–47.
 36. Peyrusse O. A superconfiguration model for broadband spectroscopy of non-LTE plasmas // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2000. Vol. 33, no. 20. P. 4303–4321.
 37. Hansen S.B., Bauche J., Bauche-Arnoult C., Gu M.F. Hybrid atomic models for spectroscopic plasma diagnostics // *High Energy Density Physics*. 2007. Vol. 3, no. 1-2. P. 109–114.
 38. Porcherot Q., Pain J., Gilleron F., Blenski T. A consistent approach for mixed detailed and statistical calculation of opacities in hot plasmas // *High Energy Density Physics*. 2011. Vol. 7, no. 4. P. 234–239.
 39. Hansen S.B. Configuration interaction in statistically complete hybrid-structure atomic models // *Canadian Journal of Physics*. 2011. Vol. 89, no. 5. P. 633–638.
 40. Hansen S.B., Bauche J., Bauche-Arnoult C. Superconfiguration widths and their effects on atomic models // *High Energy Density Physics*. 2011. Vol. 7,

- no. 1. P. 27–37.
41. Ovechkin A.A., Loboda P.A., Novikov V.G. et al. RESEOS – A model of thermodynamic and optical properties of hot and warm dense matter // High Energy Density Physics. 2014. Vol. 13. P. 20–33.
 42. Ovechkin A.A., Loboda P.A., Falkov A.L. Transport and dielectric properties of dense ionized matter from the average-atom RESEOS model // High Energy Density Physics. 2016. Vol. 20. P. 38–54.
 43. Faussurier G., Blancard C., Berthier E. Nonlocal thermodynamic equilibrium self-consistent average-atom model for plasma physics // Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics. 2001. Vol. 63, no. 2. P. 13.
 44. Rickert A. Review of the third international opacity workshop and code comparison study // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1995. Vol. 54, no 1-2. P. 325–332.
 45. Lee R.W., Nash J.K., Ralchenko Y. Review of the NLTE kinetics code workshop // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1997. Vol. 58, no. 4-6. P. 737–742.
 46. Bowen C., Decoster A., Fontes C.J. et al. Review of the NLTE emissivities code comparison virtual workshop // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2003. Vol. 81, no. 1-4. P. 71–84.
 47. Bowen C., Lee R.W., Ralchenko Yu. Comparing plasma population kinetics codes: Review of the NLTE-3 Kinetics Workshop // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2006. Vol. 99, no. 1-3. P. 102–119.
 48. Rubiano J.G., Florido R., Bowen C. et al. Review of the 4th NLTE Code Comparison Workshop // High Energy Density Physics. 2007. Vol. 3, no. 1-2. P. 225–232.

49. Fontes C.J., Abdallah J., Bowen C. et al. Review of the NLTE-5 kinetics workshop // High Energy Density Physics. 2009. Vol. 5, no. 1-2. P. 15–22.
50. Chung H.K., Bowen C., Fontes C.J. et al. Comparison and analysis of collisional-radiative models at the NLTE-7 workshop // High Energy Density Physics. 2013. Vol. 9, no. 4. P. 645–652.
51. Piron R., Gilleron F., Aglitskiy Y. et al. Review of the 9th NLTE code comparison workshop // High Energy Density Physics. 2017. Vol. 23. P. 38–47.
52. Hansen S.B., Chung H.K., Fontes C.J. et al. Review of the 10th Non-LTE code comparison workshop // High Energy Density Physics. Vol. 35. Elsevier B.V., 2020. P. 100693.
53. Hake P., Sherrill M.E., Mazevet S. et al. The new Los Alamos opacity code ATOMIC // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2006. Vol. 99, no. 1-3. P. 265–271.
54. Colgan J., Kilcrease D.P., Magee N.H. et al. A new generation of Los Alamos opacity tables // The Astrophysical Journal. 2016. Vol. 817, no. 2. P. 116.
55. Scott H.A. Cretin—a radiative transfer capability for laboratory plasmas // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2001. Vol. 71, no. 2-6. P. 689–701.
56. Gilleron F., Piron R. The fast non-LTE code DEDALE // High Energy Density Physics. 2015. Vol. 17. P. 219–230.
57. Gao C., Zeng J., Li Y. et al. Versatile code DLAYZ for investigating population kinetics and radiative properties of plasmas in non-local thermodynamic equilibrium // High Energy Density Physics. 2013. Vol. 9, no. 3. P. 583–593.
58. Novikov V.G. Average Atom Approximation in Non-LTE Level Kinetics // Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas / Ed. by Y. Ralchenko. Switzerland: Springer International Publishing, 2016.

- Р. 105–126.
59. Вичев И.Ю. Столкновительно-излучательная модель неравновесной плазмы с произвольным полем излучения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 18. С. 31.
 60. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б., Новиков В.Г. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000. С. 400. ISBN: 978-5-9221-0052-6.
 61. Voropinov A.I., Gandel'man G.M., Podval'nyi V.G. Electronic energy spectra and the equation of state of solids at high pressures and temperatures // Soviet Physics Uspekhi. 1970. Vol. 13, no. 1. P. 56–72.
 62. Вичев И.Ю., Грушин А.С., Новиков В.Г., Соломянная А.Д. KIAM_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы. ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. URL: <http://keldysh.ru/e-biblio/vichev>.
 63. Ralchenko Yu., Kramida A.E., Reader J., Team NIST ASD. NIST Atomic Spectra Database (version 5.7.1). [Online]. 2019. URL: <http://physics.nist.gov/asd>.
 64. Skobelev Yu.I., Loboda P.A., Faenov A.Ya. et al. Spectr-W 3 online database on atomic properties of multicharged ions // J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 653.
 65. Вичев И.Ю., Ким Д.А., Соломянная А.Д., Грушин А.С. THERMOS: Согласованное решение уравнения переноса излучения с поуровневой кинетикой в простейших геометриях // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 56. С. 30.
 66. Koshelev K.N., Ivanov V.V., Novikov V.G. et al. RZLINE code modeling of distributed tin targets for laser-produced plasma sources of extreme ultraviolet radiation // Journal of Micro/Nanolithography, MEMS, and MOEMS.

2012. Vol. 11, no. 2. P. 021112–1.
67. Faik S., Tauschwitz A.A., Basko M.M. et al. Creation of a homogeneous plasma column by means of hohlraum radiation for ion-stopping measurements // High Energy Density Physics. 2014. Vol. 10, no. 1. P. 47–55. 1304.7027.
 68. Ольховская О.Г., Гасилов В.А., Баско М.М. и др. О расчётах выходной мощности и спектра рентгеновского излучения Z-пинчей на основе многопроволочныхборок // Матем. моделирование. 2016. Т. 28, № 1. С. 3–22. Math. Models Comput. Simul., 8:4 (2016), 422–437.
 69. Абраменко Д.Б., Анциферов П.С., Астахов Д.И. и др. Плазменные источники экстремального ультрафиолетового излучения для литографии и сопутствующих технологических процессов (к 50-летию Института спектроскопии РАН) // Усп. физ. наук. 2019. Т. 189, № 3. С. 323–334. Phys. Usp., 62:3 (2019), 304–314.
 70. Вичев И.Ю., Новиков В.Г., Соломянная А.Д. Моделирование спектров излучения плазмы вольфрама // Матем. моделирование. 2008. Т. 20, № 7. С. 93–106. Math. Models Comput. Simul., 1:4 (2009), 470–481.
 71. Болховитинов Е.А., Волков Г.С., Вичев И.Ю. и др. Исследования спектров излучения быстрых Z-пинчей, образующихся при сжатии многопроволочныхборок на установке Ангара-5-1 // Физика плазмы. 2012. Т. 38, № 10. С. 894–902. Plasma Phys. Rep., 38:10 (2012), 824–832.
 72. Болдарев А.С., Болховитинов Е.А., Вичев И.Ю. и др. Методы и результаты исследований спектров излучения мегаамперных Z-пинчей на установке Ангара-5-1 // Физика плазмы. 2015. Т. 41, № 2. С. 195–199. Plasma Phys. Rep., 41:2 (2015), 178–181.
 73. Romanov I.V., Tsygvintsev I.P., Kologrivov A.A. et al. Study of the possibil-

- ity for increasing the emission of soft x-rays from the plasma of a low-energy vacuum discharge triggered by a laser // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2019. Vol. 61, no. 9. P. 095011.
74. Vichev I.Yu., Solomyannaya A.D., Grushin A.S., Kim D.A. On certain aspects of the THERMOS toolkit for modeling experiments // High Energy Density Physics. 2019. P. 100713.
 75. Вергунова Г.А., Гуськов С.Ю., Вичев И.Ю. и др. Особенности генерации лазерно-индуцированного рентгеновского излучения и его воздействия на вещество применительно к задачам лазерного термоядерного синтеза // ЖЭТФ. 2022. Т. 161, № 6. С. 887–896. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 134:6 (2022), 754–761.
 76. Novikov V.G., Vichev I.Y., Solomyannaya A.D. Calculation of tungsten emission spectra for mega ampere Z-pinchs // Proceedins of 16th IEEE International Pulsed Power Conference. New Mexico, Albuquerque: 2007. P. 1785–1788.
 77. Zaytsev V.I., Novikov V.G., Volkov G.S., et al. Study of the X-ray spectrum of the heavy-ion Z-pinch // 35th EPS Conference on Plasma Physics. Vol. 32D. Hersonissos: 2008. URL: http://ocs.ciemat.es/EPS2008/pdf/P1_125.pdf.
 78. Gasilov V.A, Olkhovskaya O.G., Boldarev A.S. et al. 3D MHD simulation of wire-array Z-pinch implosion under the action of high current pulse // 2014 International Conference on Computer Technologies in Physical and Engineering Applications (ICCTPEA). 2014. P. 52–53.
 79. Olkhovskaya O.G., Basko M.M., Sasorov P.V. et al. Radiative power and x-ray spectrum numerical estimations for wire array Z-pinchs // Journal of Physics: Conference Series. 2015. Vol. 653, no. 1. P. 012148.

80. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю. Сравнение и анализ спектров плазмы железа (по материалам семинара NLTE9) // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 123. С. 20.
81. Вичев И.Ю., Грушин А.С., Цыгвинцев И.П. и др. О нахождении параметров плазмы по интегральному спектру // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 2. С. 20.
82. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Ким Д.А. Метод вычисления ионного уширения в неравновесной плазме // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 121. С. 20.
83. Грушин А.С., Вичев И.Ю., Ким Д.А., Соломянная А.Д. Методы приближённого учёта неравновесности поля излучения при моделировании свойств плазмы // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 10. С. 22.
84. Вичев И.Ю. Моделирование сильно фотоионизованной плазмы кремния // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 45. С. 15.
85. Новиков В.Г., Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Грушин А.С. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ “THERMOS: Библиотека функций для расчета радиационных и термодинамических свойств различных веществ и смесей в широкой области температур и плотностей” №2013614395 от 03.07.2013. Правообладатель: ФГБУН ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.
86. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Грушин А.С., Ким Д.А. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ “Программный модуль THERMOS_CRE для расчёта радиационных и термодинамических свойств веществ в стационарном приближении столкновительно-излучательного равновесия с произвольным полем излучения” №2022610462

- от 12.01.2022. Правообладатель: ФГУ “ФИЦ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН”.
87. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Грушин А.С., Ким Д.А. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ “Программный модуль THERMOS_Layer для расчёта свойств плазмы с учётом эффектов непрозрачности при конечных размерах” №2022610808 от 17.01.2022. Правообладатель: ФГУ “ФИЦ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН”.
 88. Никифоров М.Г. Математическое моделирование неравновесной кинетики ионизации вещества лазерным излучением: Кандидатская диссертация. 2002.
 89. Romanov G.S., Stankevich Yu.A., Stanchits L.K., Stepanov K.L. Thermodynamic and optical properties of gases in a wide range of parameters // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1995. Vol. 38. P. 545–556.
 90. Орешкин В.И. Моделирование излучения плотной высокотемпературной плазмы и физических процессов, протекающих при имплозии Z-пинчей: Докторская диссертация. 2004.
 91. Иванов Е.М. Моделирование кинетики ионизации и спектральных оптических характеристик многозарядных ионов в неравновесной плазме: Кандидатская диссертация. 2005.
 92. Cunto W., Mendoza C. The Opacity Project-the TOPBASE atomic database // Revista Mexicana De Astronomia Y Astrofisica. 1992. Vol. 23. P. 107–118.
 93. Vinko S., Ciricosta O., Cho B., et al. Creation and diagnosis of a solid-density plasma with an X-ray free-electron laser // Nature. 2012. Vol. 482, no. 7383. P. 59–62.
 94. Ciricosta O., Vinko S.M., Chung H.K. et al. Direct Measurements of the

- Ionization Potential Depression in a Dense Plasma // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 109. P. 065002.
95. Young L., Kanter E.P., Krässig B. et al. Femtosecond electronic response of atoms to ultra-intense X-rays // Nature. 2010. Vol. 466, no. 7302. P. 56–61.
 96. Nagler B., Zastrau U., Fäustlin R.R. et al. Turning solid aluminium transparent by intense soft X-ray photoionization // Nature Physics. 2009. Vol. 5, no. 9. P. 693–696.
 97. Waldrop M.M. X-ray science: The big guns // Nature. 2014. Vol. 505, no. 7485. P. 604–606.
 98. Mimura H., Yumoto H., Matsuyama S., et al. Generation of 10^{20} Wcm $^{-2}$ hard X-ray laser pulses with two-stage reflective focusing system // Nature Communications. 2014. Vol. 5, no. 1. P. 1–5.
 99. Iglesias C.A., Sonnad V., Wilson B.G., Castor J.I. Frequency dependent electron collisional widths for opacity calculations // High Energy Density Physics. 2009. Vol. 5, no. 1-2. P. 97–104.
 100. Sobel'man I.I., Vainshtein L.A., Yukov E.A. Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1995. ISBN: 978-3-540-58686-9.
 101. Regemorter H. Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres. // The Astrophysical Journal. 1962. Vol. 136. P. 906.
 102. Lotz W. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to Z=108 // Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei. 1970. Vol. 232, no. 2. P. 101–107.
 103. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, 1982. Т. Часть II. С. 423.
 104. Novikov V.G., Zakharov S.V. Modeling of non-equilibrium radiating tungsten liners // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.

2003. Vol. 81, no. 1-4. P. 339–354.
105. Kramers H.A. On the theory of X-ray absorption and of the continuous X-ray spectrum // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. 1923. Vol. 46, no. 275. P. 836–871.
 106. Жданов В.П. Диэлектронная рекомбинация // Вопросы теории плазмы / Под ред. М.А. Леонтович, Б.Б. Кадомцев. Москва: Энергоиздат, 1982. С. 79–92.
 107. Oxenius J. Kinetic theory of particles and photons : theoretical foundations of non-LTE plasma spectroscopy. Springer-Verlag, 1986. P. 353. ISBN: 9783540158097.
 108. Faussurier G., Blancard C. Degeneracy and relativistic microreversibility relations for collisional-radiative equilibrium models // Physical Review E. 2017. Vol. 95, no. 6. P. 063201.
 109. Voigt W. Über das Gesetz der Intensitätsverteilung innerhalb der Linien eines Gasspektrums. 1912. URL: <https://publikationen.badw.de/de/003395768>.
 110. Stewart J.C., Pyatt K.D. Lowering of Ionization Potentials in Plasmas // The Astrophysical Journal. 1966. Vol. 144. P. 1203.
 111. Ecker G., Kröll W. Lowering of the Ionization Energy for a Plasma in Thermodynamic Equilibrium // Physics of Fluids. 1963. Vol. 6, no. 1. P. 62.
 112. Zakharov V.S., Novikov V.G. Modeling of ionization composition in argon plasma with fast electrons // Mathematical Models and Computer Simulations. 2009. Vol. 1, no. 5. P. 533–542.
 113. Eliezer S., Krumbein A.D., Salzmann D. A generalised validity condition for local thermodynamic equilibrium in a laser-produced plasma // Journal of Physics D: Applied Physics. 1978. Vol. 11, no. 12. P. 1693.

114. Fujimoto T., McWhirter R.W.P. Validity criteria for local thermodynamic equilibrium in plasma spectroscopy // *Physical Review A*. 1990. Vol. 42, no. 11. P. 6588.
115. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. С. 686.
116. Moszkowski S.A. On the Energy Distribution of Terms and Line Arrays in Atomic Spectra // *Progress of Theoretical Physics*. 1962. Vol. 28, no. 1. P. 1–23.
117. Rozsnyai B.F. Spectral lines in hot dense matter // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 1977. Vol. 17, no. 1. P. 77–88.
118. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. С. 319.
119. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Теплопроводность тяжелых веществ в области высоких температур: Тех. доклад. М.: Отделения прикладной математики математического института им. В.А. Стеклова, 1965.
120. Sampson D.H., Parks A.D. Electron-impact excitation cross-sections for complex ions. II - Application to the isoelectronic series of helium and other light elements // *The Astrophysical Journal Supplement Series*. 1974. Vol. 28, no. 263. P. 323.
121. Воропинов А.И., Гандельман Г.М., Подвальный В.Г. Электронные энергетические спектры и уравнение состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах // *УФН*. 1970. Т. 100, № 2. С. 193–224.
122. Liberman D.A. Self-consistent field model for condensed matter // *Physical Review B*. 1979. Vol. 20, no. 12. P. 4981.
123. More R.M., Warren K.H., Young D.A., Zimmerman G.B. A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter // *Physics of Fluids*. 1988.

- Vol. 31, no. 10. P. 3059.
124. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Physical Review B. 1996. Vol. 54, no. 16. P. 11169.
 125. Starrett C.E., Daligault J., Saumon D. Pseudoatom molecular dynamics // Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. 2015. Vol. 91, no. 1. P. 013104.
 126. Faik S., Tauschwitz A., Iosilevskiy I. The equation of state package FEOS for high energy density matter // Computer Physics Communications. 2018. Vol. 227. P. 117–125.
 127. Hoarty D.J., Allan P., James S.F. et al. Observations of the Effect of Ionization-Potential Depression in Hot Dense Plasma // Physical Review Letters. 2013. Vol. 110, no. 26. P. 265003.
 128. Fletcher L.B., Kritcher A.L., Pak A. et al. Observations of continuum depression in warm dense matter with X-ray thomson scattering // Physical Review Letters. 2014. Vol. 112, no. 14. P. 145004.
 129. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989. ISBN: 5020139963.
 130. Allen E.E. Analytical approximations // Mathematics of Computation. 1954. Vol. 8, no. 48. P. 240–240.
 131. Hastings C. Approximations for digital computers. The Rand series. Princeton edition. Princeton University Press, 1955. ISBN: 0000-0001-5-9.
 132. Saizer H.E., Zucker R., Capuano R. Table of the Zeros and Weight Factors of the First Twenty Hermite Polynomials: Tech. Rep. 2: 1952.
 133. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Специальные функции математической физики. М.: Наука, 1984. С. 343.

134. Цыгвинцев И.П., Круковский А.Ю., Новиков В.Г. Сравнение различных методов расчёта переноса излучения для трёхмерных задач // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2014. № 48. С. 14.
135. Кузенов В.В., Лебо А.И., Лебо И.Г., Рыжков С.В. Физико-математические модели и методы расчета воздействия мощных лазерных и плазменных импульсов на конденсированные и газовые среды. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2015. С. 328.
136. Basko M.M. On the maximum conversion efficiency into the 13.5-nm extreme ultraviolet emission under a steady-state laser ablation of tin microspheres // Physics of Plasmas. 2016. Vol. 23, no. 8. P. 083114.
137. Rozanov V.B., Vergunova G.A. Investigation of compression of indirect-drive targets under conditions of the NIF facility using one-dimensional modelling // Quantum Electronics. 2020. Vol. 50, no. 2. P. 162–168.
138. Grabovski E.V., Sasorov P.V., Shevelko A.P. et al. Radiative heating of thin Al foils by intense extreme ultraviolet radiation // JETP Letters. 2016. Vol. 103, no. 5. P. 350–356.
139. Gritsuk A.N., Aleksandrov V.V., Grabovskiy E.V. et al. Time - and spatially resolved spectra of X-ray radiation of Z-pinch of tungsten multiwire arrays // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1238. P. 12053.
140. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. С. 686.
141. Суржиков С.Т. Тепловое излучение газов и плазмы. МГТУ, 2004. ISBN: 5703826055.
142. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. Наука, 1979. ISBN: 9697-17-571-3.
143. Ralchenko Y. The 11th NLTE Code Comparison Workshop. 2019. URL:

<http://nlte.nist.gov/NLTE11/>.

144. Loisel G.P., Bailey J.E., Liedahl D.A. et al. Benchmark Experiment for Photoionized Plasma Emission from Accretion-Powered X-Ray Sources // Phys. Rev. Lett. 2017. Vol. 119. P. 075001.
145. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М.: Издательство иностранной литературы, 1951.
146. Younger S.M. Distorted-wave electron-impact-ionization cross sections for highly ionized neonlike atoms // Physical Review A. 1981. Vol. 23, no. 3. P. 1138–1146.
147. Younger S.M. Electron impact ionization cross sections and rates for highly ionized atoms // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1981. Vol. 26, no. 4. P. 329–337.