



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 121 за 2017 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Соломянная А.Д., Вичев И.Ю.,
Ким Д.А.

Метод вычисления ионного
уширения в неравновесной
плазме

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Ким Д.А. Метод вычисления ионного уширения в неравновесной плазме // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 121. 20 с. doi:[10.20948/prepr-2017-121](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-121)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-121>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

А.Д. Соломянная, И.Ю. Вичев, Д.А. Ким

**Метод вычисления ионного уширения
в неравновесной плазме**

Москва — 2017

Соломянная А.Д., Вичев И.Ю., Ким Д.А.

Метод вычисления ионного уширения в неравновесной плазме

В работе рассмотрен метод вычисления ионного уширения при расчете таблиц спектральных характеристик неравновесной плазмы. При расчетах таблиц радиационных свойств на основе базы данных KIAM_DB для учета Штарк-эффекта предлагается использовать двухуровневое приближение. Величины, необходимые для вычислений, содержатся в базе данных. Была проведена оценка влияния Штарк-эффекта на ширины линий в неравновесной плазме хлора и олова.

Ключевые слова: неравновесная плазма, эффект Штарка, программа THERMOS

Anna Dmitrievna Solomyannaya, Ilya Yurievich Vichev, Dmitrii Andreevich Kim

The ion broadening calculating method for a nonequilibrium plasma

In this work it is proposed a method for ionic broadening calculation for the spectral characteristics of a nonequilibrium plasma. It is proposed to use the two-level approximation based on the KIAM_DB database in the calculation of radiation properties tables for the Stark widths calculation. The values required for calculations are contained in the database. For the nonequilibrium plasma of chlorine and tin the influence of Stark effect on the line widths was estimated.

Key words: non-LTE plasma, Stark effect, code THERMOS

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №14-11-00699. Расчёты производились на суперкомпьютере "МВС-100К" (МСЦ РАН).

Оглавление

Введение.....	3
Неравновесная плазма.....	4
Эффект Штарка.....	6
Результаты расчетов.....	8
Спектр излучения плазмы хлора для семинара NLTE10	8
Прозрачная плазма олова	14
Заключение.....	18
Литература	19

Введение

В Институте прикладной математики в течение многих лет занимаются развитием моделей и методов вычисления радиационных свойств неравновесной плазмы на основе заранее вычисленных баз данных о свойствах ионов [1]. При моделировании неравновесной малоплотной плазмы только часть линий перекрывается и плазма близка к прозрачной, поэтому при расчетах профилей линий в лоренцевской ширине учитывались только естественное и электронное уширение, что не приводило к большим ошибкам при вычислениях [2].

Возможность верификации моделей и методов, используемых при описании неравновесной плазмы, предоставляется участникам семинаров по неравновесной плазме NLTE (<http://nlte.nist.gov>), в которых принимают участие рабочие группы из разных стран. Начиная с 2005 г. Россию на семинарах NLTE представляет программный комплекс THERMOS, разработанный в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН под руководством В.Г. Новикова. Для участия в семинаре The 10th NLTE Code Comparison Workshop (Сан-Диего, США, с 28 ноября по 1 декабря 2017 г.) было предложено провести расчеты стационарной неравновесной плазмы для нескольких элементов, в том числе подобрать параметры эксперимента для плазмы хлора из статьи [3]. В предложенном для моделирования случае плазма хлора близка к равновесной, и при вычислении ширины профиля необходимо учитывать ионное уширение.

Известно, что вклад ионного уширения при расчетах средних характеристик равновесной плазмы несущественен для средних и тяжелых элементов (см. например [4]). Однако в случае неравновесной плазмы при наличии массивов линий эффект Штарка с ростом плотности может оказывать влияние на вид спектра. Наиболее простой моделью для учета ионного уширения, или эффекта Штарка, является двухуровневое приближение [5]. В данной работе предложен способ учета ионного уширения линий при расчете таблиц спектральных коэффициентов неравновесной плазмы на основе базы данных KIAM_DB и приведена оценка Штарк-эффекта на спектральные коэффициенты в плазме хлора и олова.

Неравновесная плазма

При проведении газодинамических расчетов нужно знать спектральные характеристики неравновесной плазмы. Inline расчеты таких характеристик, как правило, невозможны ввиду больших временных затрат, поэтому обычно при расчетах используют заранее вычисленные таблицы для некоторых предельных случаев с использованием интерполяции между ними [6, 7].

В Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша был разработан программный комплекс THERMOS для расчета таблиц неравновесной плазмы на основе заранее вычисленных баз данных, содержащих информацию о веществе. В настоящее время комплекс состоит из набора программ, которые позволяют получать термодинамические и радиационные свойства как равновесной, так и неравновесной плазмы в широкой области температур и плотностей. Расчет характеристик неравновесной плазмы проводится по столкновительно-излучательной модели с использованием базы данных KIAM_DB [1]. Средняя "полная" база данных для вещества обычно составляется с учетом условий поставленного эксперимента. Далее с помощью программы FAS [8] уточняются положение и сила линий, попадающих в заданный диапазон длин волн. При составлении системы уравнений для скоростей столкновительных процессов используются формулы Лотца [9] и Режемортера [10]. Скорости обратных процессов получаются из принципа детального равновесия. Для процесса фотоионизации используется приближение Крамерса [11], для автоионизации и диэлектронного захвата – дипольное приближение [12]. Эта методика хорошо зарекомендовала себя при проведении сравнения с другими программами [13, 14] и позволяет проводить расчеты таблиц с точностью, подстраиваемой под эксперимент.

База данных KIAM_DB для заданного вещества с зарядом ядра Z и атомным весом A содержит описание возбужденных конфигураций Q_{ks} (k – кратность ионизации, s – порядковый номер), а именно энергию E_{ks} , статистический вес g_{ks} , нерелятивистские числа заполнения уровней $N_{n\ell}^{ks}$ (n и ℓ – соответственно главное и орбитальное квантовые числа), а также информацию о переходах между этими конфигурациями (положение $\omega(ks, k's')$ и сила линий $g_f(ks, k's')$). Положение и сила линий могут быть скорректированы с использованием более точных программ или эксперимента, а также свернуты на некоторой сетке по энергии фотонов, позволяющей передать основные особенности описываемого спектра (методика RUSAM [2, 7]). Набор конфигураций в базе данных формируется в соответствии с условиями поставленной задачи. Кроме того, в базе содержится информация о положении порогов фотоионизации и автоионизации. Для каждой кратности ионизации k также хранятся эффективные заряды ядра $Z_{n\ell}^k$, полученные методом пробного потенциала [15] в самосогласованном потенциале иона, и уровни энергии $\varepsilon_{n\ell}^{(k)}$, и радиальные волновые функ-

ции $R_{nl}^{(k)}(r)$, являющиеся решением уравнения Шредингера в нерелятивистском приближении.

Для получения спектральных характеристик неравновесной плазмы при заданной температуре ϑ (ат. ед.), плотности электронов N_e ($1/\text{см}^3$) и поле излучения $W(\omega)$ необходимо вычислить вероятности конфигураций $x = \{x_{ks}\}$ путем решения системы уравнений поуровневой кинетики в квазистационарном приближении:

$$\frac{dx}{dt} = A(x, \vartheta, N_e, W(\omega)) = 0. \quad (1)$$

Более подробно о системе кинетических уравнений рассказано, например, в работе [16].

При вычислении сечения поглощения фотона с энергией ω учитываются процессы поглощения в линиях (bound-bound), фотоионизации (bound-free) и тормозного поглощения (free-free):

$$\sigma(\omega) = \sigma^{\text{bb}}(\omega) + \sigma^{\text{bf}}(\omega) + \sigma^{\text{ff}}(\omega).$$

Так как основной вклад при переносе излучения в многоэлектронных ионах дают линии, то для сечения фотоионизации можно использовать приближённую формулу Крамерса, а для сечения тормозного поглощения – формулу Борна–Эльверта [17]. Сечение поглощения фотонов в линиях $\sigma^{\text{bb}}(\omega)$ определяется суммой сечений одноэлектронных переходов $ks \rightarrow ks'$

$$\sigma^{\text{bb}}(\omega) = \sum_{ks} x_{ks} \sum_{s'} \sigma_{ks,ks'}^{\text{bb}}(\omega),$$

где вероятности возбужденных состояний ионов x_{ks} получаются из решения системы кинетических уравнений (1), а приведенное сечение поглощения вычисляется по формуле

$$\sigma_{ks,ks'}^{\text{bb}}(\omega) = 2\pi^2 \alpha a_0^2 f_{ks,ks'} \Phi_{ks,ks'}(\omega, D, \gamma),$$

где $a_0 = 5,291772 \cdot 10^{-9}$ см – боровский радиус, $\alpha = 1/137,036$ – постоянная тонкой структуры, $f_{ks,ks'}$ – сила осциллятора перехода между состояниями $ks \rightarrow ks'$, $\Phi_{ks,ks'}(\omega, D, \gamma)$ – профиль спектральной линии с гауссовой шириной D и лоренцевской шириной γ . Нормировка профиля $\int_{\omega} \Phi_{ks,ks'}(\omega, D, \gamma) d\omega = 1$. Профиль линии может быть фойгтовским, или может быть использован профиль, например, из статьи [18].

При расчетах таблиц в гауссову ширину D включаются доплеровское уширение линии, "инструментальное" уширение, связанное с шагом сетки по энергии фотонов, и уширение за счет учета спин-орбитального взаимодействия, полученное либо по среднему атому методом Мошковского [19], либо из детальной информации о линиях путем усреднения по методике RUSAM. Лоренцевская ширина включает в себя, как правило, радиационное уширение и уширение за счет взаимодействия со свободными электронами. Однако в случае неравновесной плазмы при наличии массивов линий эффект Штарка с ростом

плотности может оказывать влияние на вид спектра. Наиболее простой моделью для учета эффекта Штарка является двухуровневое приближение.

Эффект Штарка

Эффект Штарка вызывает смещение и расщепление электронных термов атомов во внешнем электрическом поле. Кроме того, смещение термов зависит от поля, созданного соседними атомами и молекулами.

Линейный эффект Штарка, величина которого пропорциональна первой степени напряжённости электрического поля, наблюдается только у водородоподобных атомов. В остальных случаях расщепление спектральных линий в электрическом поле пропорционально квадрату напряжённости электрического поля. Такой эффект Штарка называется квадратичным.

В заданном постоянном электрическом поле \vec{F} при вычислении профилей линий будем учитывать влияние ионов как дополнительное лоренцевское уширение [5]:

$$\gamma_{n\ell, n'\ell'}^{(st)} = d_{n\ell} + d_{n'\ell'} + \frac{1}{3}|q_{n\ell} + q_{n'\ell'}| + \frac{1}{6}|q_{n\ell} - q_{n'\ell'}|. \quad (2)$$

Здесь $d_{n\ell}$ – дипольный вклад, приводящий к сдвигу линий за счет взаимодействия с ближайшими по энергии уровнями, а $q_{n\ell}$ – квадрупольный вклад – учитывает расщепление уровней по квантовому числу m (проекция орбитального момента на направление поля). Первое слагаемое в (2) относится к переходам $\Delta m \pm 1$, второе – к $\Delta m = 0$.

$$q_{n\ell} = 3F \frac{Z_0}{(r_0)^3} \frac{\ell^2}{(2\ell+3)(2\ell-1)} \langle r^2 \rangle_{n\ell, n\ell}, \quad \ell > 0,$$

где $r_0 = 1,388(A/\rho)^{1/3}$ – радиус электронейтральной сферической атомной ячейки, определяющийся через $\rho = N_e A / (N_A Z_0)$ – плотность вещества и $Z_0 = \sum_{ks} kx_{ks}$ – средний заряд плазмы,

$$\langle r^2 \rangle_{n\ell, n\ell} = \int r^2 R_{n\ell}^2(r) dr. \quad (3)$$

При использовании двухуровневого приближения полагаем, что только два уровня расположены настолько близко, что возникает необходимость учета их расщепления. Так как заранее неизвестно, какой из ближайших к $\varepsilon_{n\ell}$ уровней ($\varepsilon_{n, \ell-1}$ или $\varepsilon_{n, \ell+1}$) оказывает максимальное влияние на него, будем вычислять среднюю величину сдвига по формуле

$$d_{n\ell} = \Delta_{n\ell}^{n, \ell-1} + \Delta_{n\ell}^{n, \ell+1},$$

где

$$\Delta_{n\ell}^{n'\ell'} = \frac{\varepsilon_{>} - \varepsilon_{<}}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{>} - \varepsilon_{<}}{2}\right)^2 + \langle V_{12}^2 \rangle} \quad (4)$$

$$(\varepsilon_{<} = \min\{\varepsilon_{n\ell}, \varepsilon_{n'\ell'}\}, \quad \varepsilon_{>} = \max\{\varepsilon_{n\ell}, \varepsilon_{n'\ell'}\}).$$

Здесь $V_{12} = V_{21} = \langle n\ell m | F z | n'\ell' m' \rangle$ – матричный элемент взаимодействия электрона с электрическим полем \vec{F} :

$$\langle n\ell m | F z | n'\ell' m' \rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{(\ell+1)^2 - m^2}{(2\ell+3)(2\ell+1)}} F r_{n\ell, n'\ell'} & (\ell' = \ell+1), \\ \sqrt{\frac{\ell^2 - m^2}{(2\ell+1)(2\ell-1)}} F r_{n\ell, n'\ell'} & (\ell' = \ell-1) \end{cases}$$

(матричный элемент отличен от нуля только при значениях $m' = m$ и $\ell' = \ell \pm 1$).

Величину $\Delta\varepsilon$ усредним по направлению поля \vec{F} , что эквивалентно усреднению по проекции орбитального момента m на направление поля. Предполагая в основном квадратичную зависимость от поля ($(\Delta/2)^2 \gg V_{12}^2$), среднее значение $\Delta\varepsilon$ можно получить, подставляя в (4) вместо V_{12}^2 величину

$$\begin{aligned} \langle V_{12}^2 \rangle &= \frac{1}{2\ell_{<}} \sum_{m=-\ell_{<}}^{\ell_{<}} \left| \langle n\ell m | F z | n'\ell' m' \rangle \right|^2 = \frac{\ell_{<} F^2 r_{n\ell, n'\ell'}^2}{3(2\ell_{<} + 1)}, \\ (\ell_{<} = \min\{\ell, \ell'\}, \quad \ell_{>} = \max\{\ell, \ell'\}), \\ r_{n\ell, n'\ell'} &= \int R_{n\ell}(r) r R_{n'\ell'}(r) dr. \end{aligned} \quad (5)$$

Исходное допущение статистической теории ионного уширения состоит в том, что сдвиги спектральной линии (точнее, любой ее компоненты) являются функцией напряженности электрического поля F , распределение вероятностей которого $W(F)$ считается известным. При моделировании плазмы, для которой существенны эффекты неравновесности, эффективный радиус ионного остова, как правило, много меньше радиуса атомной ячейки. При таких условиях электрическое поле, создаваемое ионами, можно считать однородным в пределах рассматриваемого иона. Заметим, что свободные электроны не дают вклада в электрическое поле ввиду того, что они предполагаются распределенными равномерно по пространству. Для распределения ионного микрополя, справедливого в широкой области температур и плотностей, будем использовать формулу из [20]:

$$W(F) = \frac{H(u)}{F_0}, \quad H(u) = \frac{2u}{\pi} \int_0^{\infty} x \sin(ux) \exp\left(-\frac{x^{3/2}}{\left(1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{x}}\right)^{1.2876}}\right) dx, \quad (6)$$

где $u = F/F_0$, $F_0 = 2\pi Z_0 (4n/15)^{2/3}$ – нормальная хольцмарковская напряженность поля, Γ – параметр неидеальности, $n = 1/v$ – концентрация ионов в атомных единицах ($v = \frac{4}{3}\pi r_0^3$ – объем атомной ячейки). В качестве параметра неидеальности можно взять соответствующий параметр для взаимодействия ионов между собой в приближении среднего атома: $\Gamma = Z_0^2 / (\theta r_0)$. Распределение (6) пере-

ходит в распределение Хольцмарка при $\Gamma \rightarrow 0$ и в приближение простых гармонических осцилляторов в противоположном случае $\Gamma \rightarrow \infty$.

Уширение за счет Штарк-эффекта по формуле (2) вычисляется в поле F , которое имеет максимальную вероятность в соответствии с распределением (6).

Таким образом, при расчетах таблиц спектральных коэффициентов по базе данных необходимо знать матричные элементы вида $\langle r \rangle_{nl, n'l'}$ (5) и $\langle r^2 \rangle_{nl, nl}$ (3). Эти элементы будут зависеть от кратности ионизации k . Уровни энергии $\varepsilon_{nl}^{(k)}$ и средние заряды ядра $Z_{nl}^{(k)}$ уже содержатся в базе данных. Для матричных элементов $\langle r^2 \rangle_{nl, n'l'}(k)$ используется водородоподобное приближение

$$\int r^2 R_{nl}^2(r) dr = \frac{n^2}{2(Z_{nl}^{(k)})^2} (5n^2 - 3\ell^2 - 3\ell + 1),$$

для которого в случае свободного атома значения интегралов совпадают с вычисленными по волновым функциям. Однако при вычислении $\langle r \rangle_{nl, n'l'}$, как было показано в [21], использование водородоподобного приближения может привести к существенным ошибкам, поэтому в базу данных были добавлены значения $\langle r \rangle_{nl, n'l'}(k)$.

Результаты расчетов

Спектр излучения плазмы хлора для семинара NLTE10

Семинары NLTE проводятся 1 раз в 2 года и представляют большой интерес для рабочих групп, занимающихся моделированием неравновесной плазмы. Во время работы семинара проводится сравнение различных характеристик плазмы при заданных начальных условиях. Всем участникам семинара предлагается провести расчеты плазменных характеристик хотя бы 1 случая из предложенного организаторами списка. В этом году семинар The 10th NLTE Code Comparison Workshop, 2017 проходил в Сан-Диего, США с 28 ноября по 1 декабря (<http://nlte.nist.gov/NLTE10/>). В качестве одного из тестовых вариантов было предложено провести расчеты стационарной неравновесной плазмы хлора при температурах 400, 500 и 600 эВ и плотности электронов 10^{21} , 10^{22} и 10^{23} 1/см³. Кроме того, было предложено определить параметры плазмы, наиболее верно описывающие эксперимент из статьи [3].

В статье описаны эксперименты по измерению формы спектральных линий с помощью рентгеновского спектрометра высокого разрешения в плазме, полученной на лазерной установке ORION в Англии. Исходя из условий эксперимента, плотность плазмы находится в диапазоне от 10^{19} до 10^{24} 1/см³. Представлены также расчеты спектров, которые показывают, что с помощью соотношения интенсивностей, снятых с хорошим разрешением Li-подобных спутников, можно определить плотность вещества при плотности плазмы ниже 10^{22} 1/см³. При более высоких плотностях для определения плотности исполь-

зается ширина линии He- β . Температура электронов определялась из соотношения Li-подобных линий-сателлитов, соответствующих диэлектронным рекомбинационным состояниям.

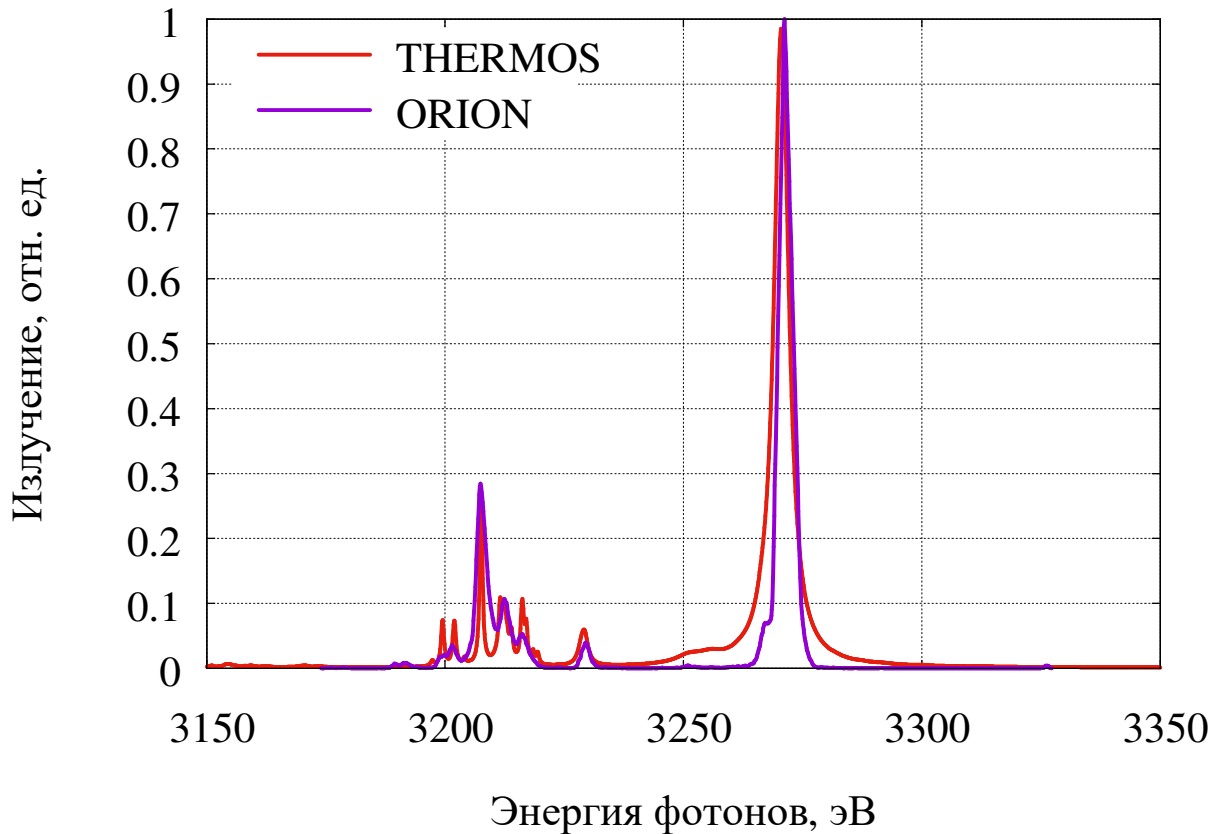


Рис. 1. Спектр излучения Li-подобных сателлитов в плазме хлора. ORION – экспериментальные данные. THERMOS – спектр излучения плоского слоя плазмы хлора с толщиной $L = 400$ нм при температуре 600 эВ и плотности электронов 10^{23} $1/\text{см}^3$

На экспериментальном спектре плазмы хлора (см. рис. 1) можно видеть две группы линий, соответствующие переходам $1s3p \rightarrow 1s^2$ (положение сильной линии 3270 эВ) в ионе Cl^{+15} и переходам в ионе Cl^{+14} : $1s2s3p \rightarrow 1s^22s$ (2 основных массива линий, расположенные на 3212 и 3229 эВ) и $1s2p3p \rightarrow 1s^22p$ (массив линий от 3197 до 3224 эВ с сильной линией на 3208 эВ). Для моделирования спектра необходимо провести расчет характеристик плазмы в области параметров, близких к экспериментальным данным. Приведенные в статье оценки дают температуру 500 эВ и плотность электронов от 10^{19} до 10^{22} $1/\text{см}^3$.

Для тестовых расчетов и моделирования спектра была подготовлена база данных хлора с максимальным главным квантовым числом $n_{\text{max}} = 6$. Конфигурации, положение линий и силы осцилляторов для максимального числа ионов были вычислены в приближении свободного среднего атома. Далее с помощью программы FAC были уточнены положение и силы осцилляторов для наиболее сильных линий, которые были усреднены с помощью методики RUSAM: на интервале энергий фотонов от 3150 до 3350 эВ использовалась сетка с шагом 0,1 эВ.

На рис. 2 приведена средняя степень ионизации в плазме хлора при температурах 400, 500 и 600 эВ в диапазоне плотностей электронов от 10^{19} до 10^{23} $1/\text{см}^3$. Для справки приведена также средняя степень ионизации для равновесной (оптически плотной) плазмы. Из рисунка можно видеть, что плазма хлора при этих условиях близка к равновесной только при 400 эВ и плотности электронов 10^{23} $1/\text{см}^3$. В остальных точках плазма далека от равновесия. Ионизация хлора в прозрачной плазме изменяется между 14 и 15.

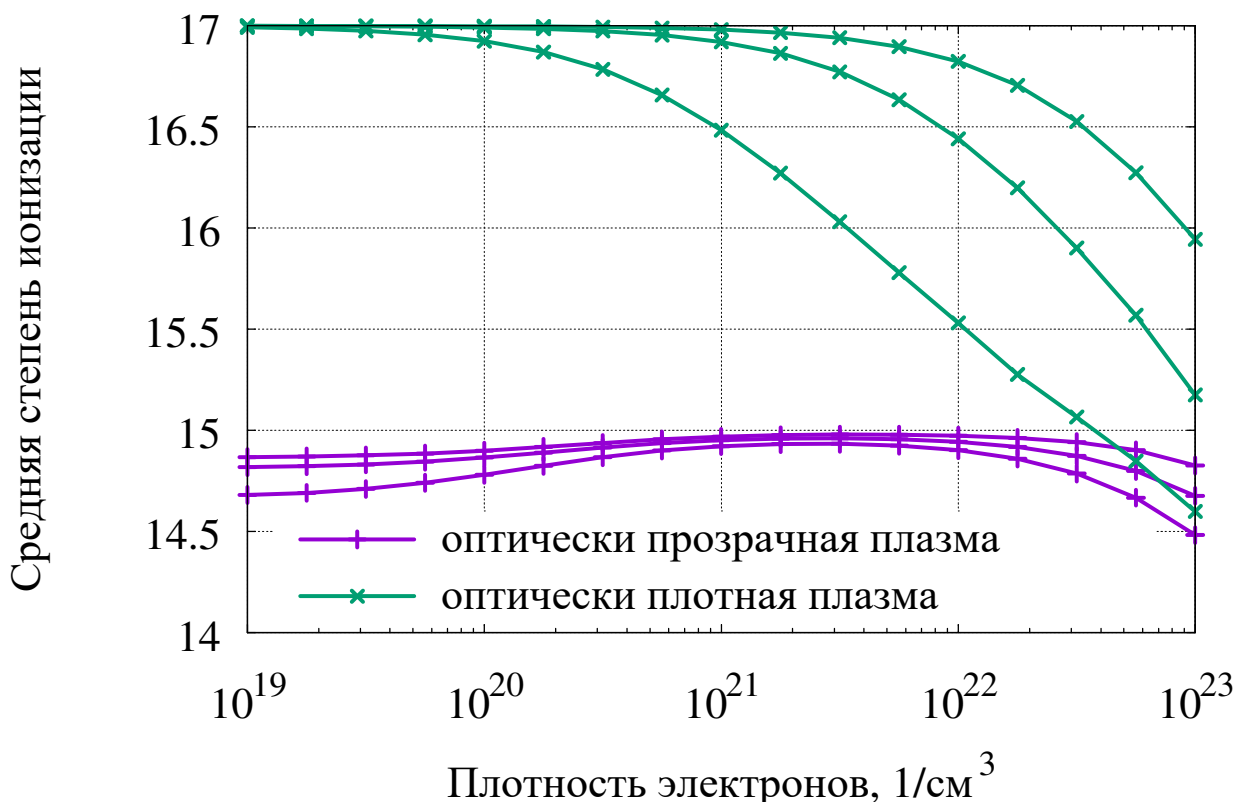


Рис. 2. Средняя степень ионизации оптически прозрачной и оптически плотной плазмы хлора при температурах 400, 500 и 600 эВ и разных плотностях

Из предложенных для тестового расчета случаев по ширинам линий и соотношению профилей к эксперименту оказался всех ближе вариант, соответствующий температуре 600 эВ и плотности электронов 10^{23} $1/\text{см}^3$. Однако, чтобы уменьшить интенсивность линии $1s3p \rightarrow 1s^2$, пришлось подобрать толщину слоя. Для вычисления потока излучения, выходящего из плоского слоя с заданной толщиной L (см), использовалась формула:

$$F_{\omega} = \pi \frac{j_{\omega}}{\rho \kappa_{\omega}} \left[1 - e^{-\tau} + \tau e^{-\tau} - \tau^2 E_1(\tau) \right], \quad (7)$$

где $E_k(x) = \int_x^{\infty} t^{-k} e^{-t} dt$ — интегральная экспонента, $\tau = \kappa_{\omega} L$ — оптическая толщина.

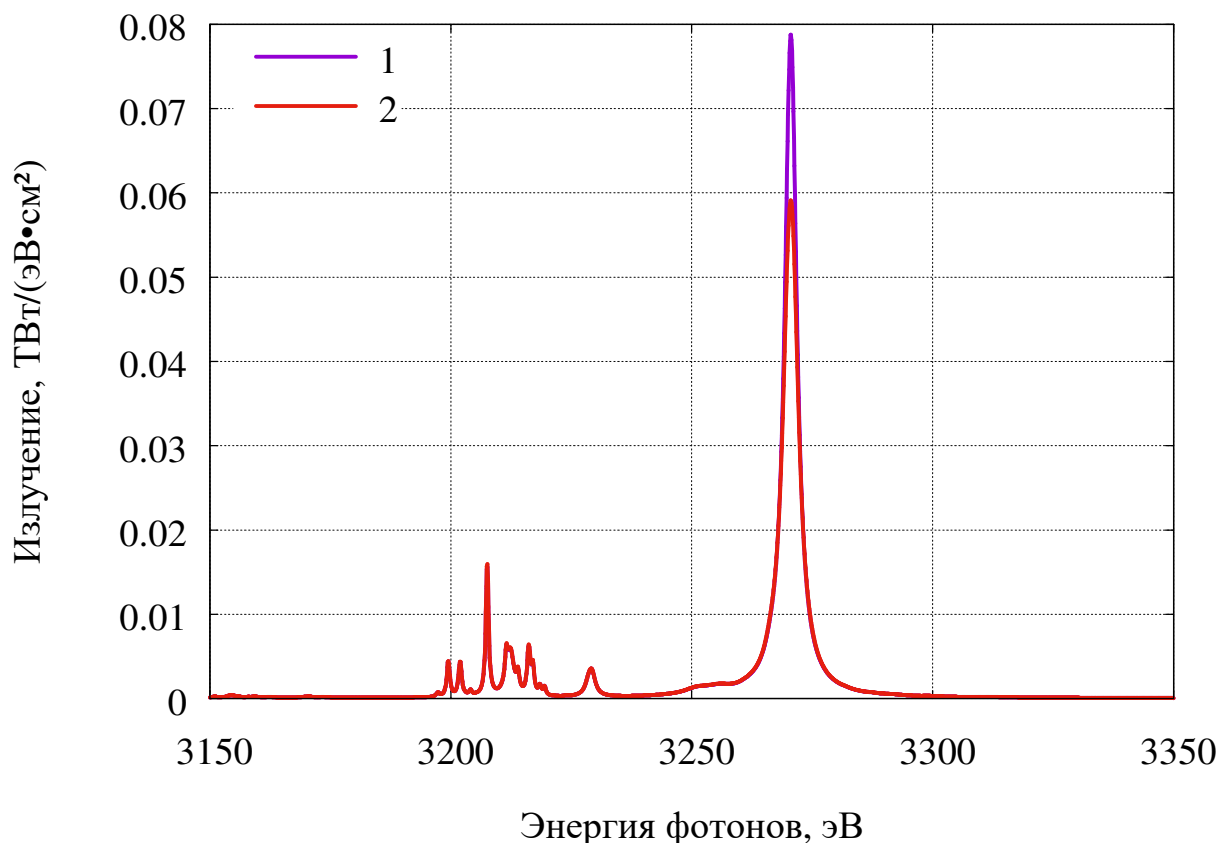


Рис. 3. Спектр излучения плоского слоя хлора с толщиной $L = 400$ нм при температуре 600 эВ и плотности электронов 10^{23} $1/\text{см}^3$. 1 – без учета поглощения. 2 – с учетом поглощения

На рис. 3 приведено излучение плоского слоя плазмы хлора с толщиной $L = 400$ нм при температуре 600 эВ и плотности электронов 10^{23} $1/\text{см}^3$. График, отмеченный цифрой 1, соответствует излучению прозрачного слоя плазмы хлора: $F_{\omega} = 2\pi j_{\omega} L$. На графике, отмеченном цифрой 2, учтено перепоглощение излучения по формуле (7). Приведенные данные получены для коэффициентов излучения j_{ω} и поглощения k_{ω} , вычисленных для прозрачной плазмы (без итераций по полю излучения).

Отношение вероятностей возбужденных конфигураций $1s2s3p$ и $1s2p3p$ иона Cl^{+14} в зависимости от электронной плотности и при разных температурах приведена на рис. 4. Населенность этих уровней определяется из решения системы кинетических уравнений, при этом основную роль играет соотношение скоростей столкновительного возбуждения и диэлектронной рекомбинации. В этой области параметров отношение между вероятностями конфигураций $P(1s2p3p) / P(1s2s3p)$ оказалось максимальным, что и требуется для описания экспериментального спектра. Для температуры плазмы 600 эВ был проведен анализ ширины линий $1s2s3p \rightarrow 1s^22s$ и $1s2p3p \rightarrow 1s^22p$ в зависимости от плотности электронов (см. рис. 3). Радиационная и электронная ширина линий определялись из скоростей соответствующих процессов: в прозрачной плазме это из-

лучение и столкновительное возбуждение/девозбуждение. В программном комплексе THERMOS скорости процессов в настоящее время вычисляются для нерелятивистских конфигураций:

$$\alpha(Q \rightarrow Q') \equiv \alpha(n\ell \rightarrow n'\ell') = \sum_{\gamma J, \gamma' J'} \alpha(n\ell \gamma J \rightarrow n'\ell' \gamma' J').$$

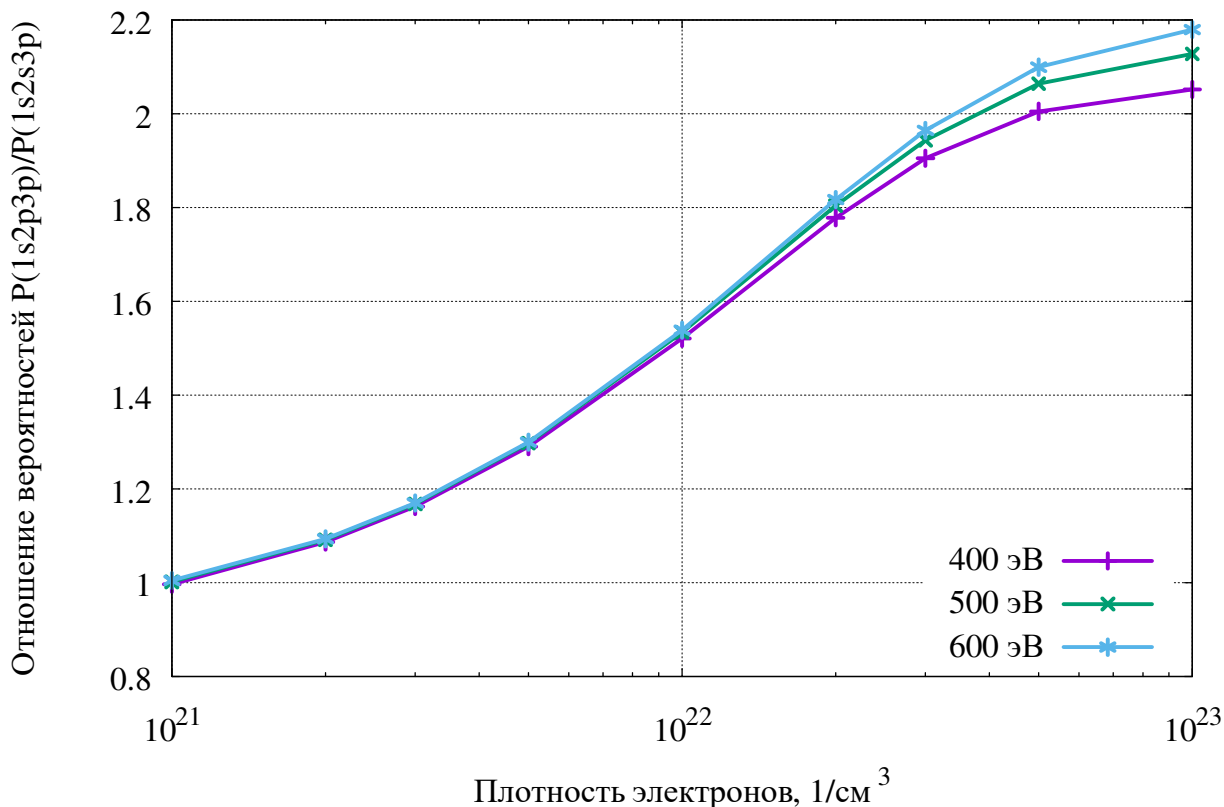


Рис. 4. Соотношение вероятностей реализации автоионизационных Li подобных состояний в плазме хлора в прозрачной плазме при разных температурах и плотностях.

Радиационная ширина линий составляет $\gamma^{rad}(1s2s3p \rightarrow 1s^22s) = 0,004$ эВ и $\gamma^{rad}(1s2p3p \rightarrow 1s^22p) = 0,016$ эВ и не зависит от плотности. Электронное и ионное уширение растут пропорционально плотности, однако электронное уширение в этом случае в среднем на порядок больше ионного.

При разработке моделей и методов для расчетов таблиц неравновесной плазмы в программном комплексе THERMOS изначально основное внимание уделялось описанию идеальной плазмы. На семинарах NLTE в большинстве случаев также внимание уделялось моделированию малоплотной идеальной плазмы, в которой ионное уширение несущественно. Для плазмы хлора тестовые случаи относятся к неидеальной плазме (см. рис. 6). Для таких значений плотности необходимо провести оценку снижения потенциала ионизации [22]. В качестве простейшего приближения можно использовать формулу (в ат. ед.)

$$\Delta U(Z) = \frac{3Z}{2r_0}.$$

Исходя из этой формулы, можно определить, что снижение потенциала ионизации хлора при плотности электронов 10^{23} $1/\text{см}^3$ будет составлять около 100 эВ, в то время как энергии дискретных уровней с главным квантовым числом $n=6$ составляют ≈ 75 эВ. Таким образом, для этой плотности нужно из существующей базы данных исключить конфигурации с электронами на 6 оболочке и снизить потенциал ионизации уровней в соответствии с получаемой плотностью. Кроме того, чтобы не было резких скачков в ширинах линий, необходимо включить в механизмы уширения процессы, связанные с ионизацией. Это может повлиять на ширины линий и изменить влияние эффекта Штарка.

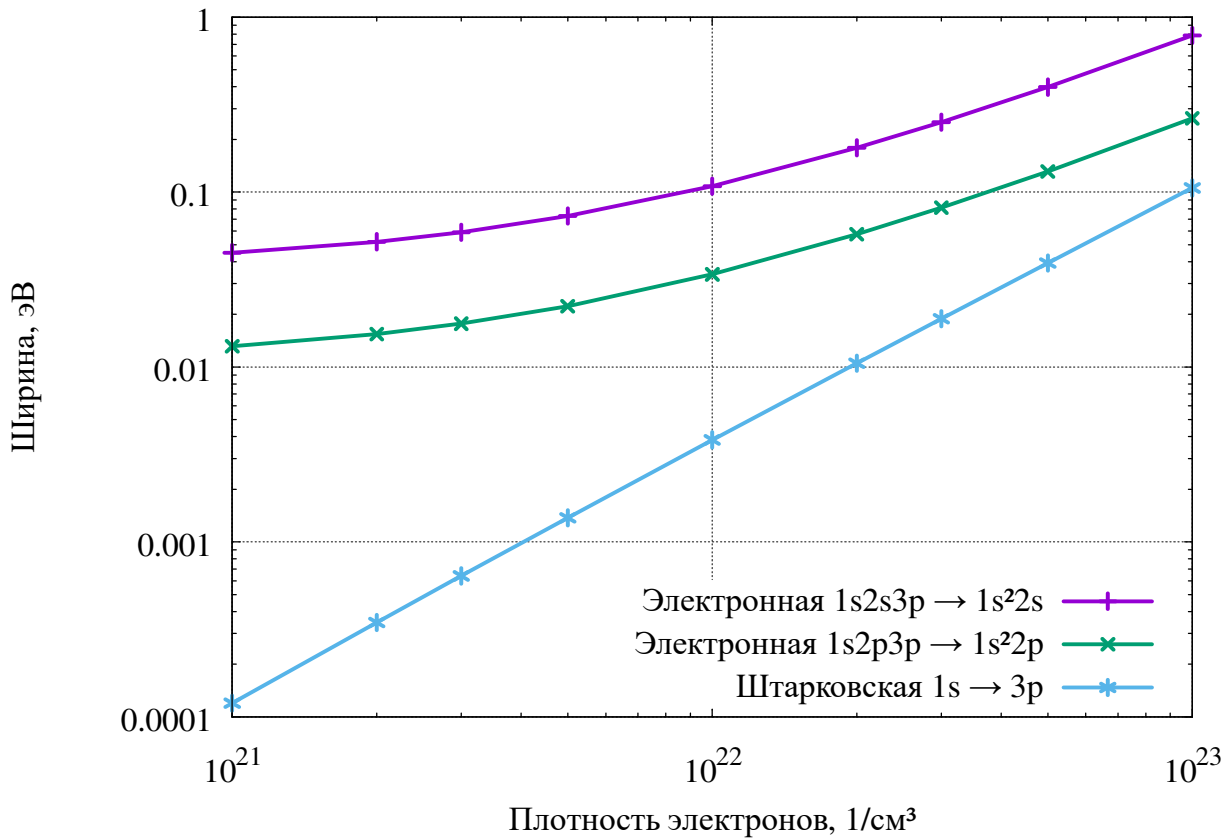


Рис. 5. Ширина линий в зависимости от плотности электронов при температуре 600 эВ

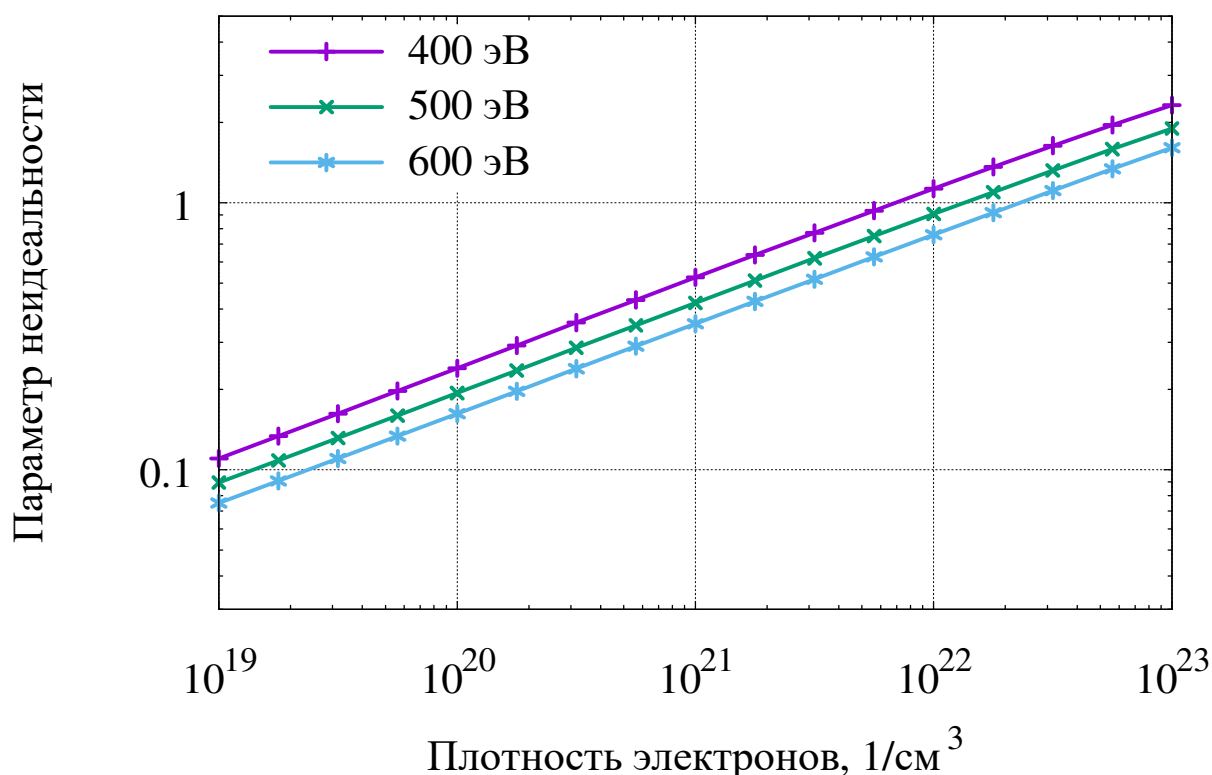


Рис. 6. Параметр неидеальности прозрачной плазмы хлора при разных температурах и плотностях

Прозрачная плазма олова

В связи с разработкой источника для литографических установок большое внимание уделяется моделированию спектра олова [23, 24]. Поэтому необходимо провести оценку возможного влияния эффекта Штарка в рабочей области параметров.

На рис. 7 приведена средняя степень ионизации в прозрачной плазме олова при температурах от $T = 10$ до 100 эВ (шаг сетки $\Delta \lg T = 0,1$) и плотностях электронов от 10^{17} до 10^{23} $1/\text{см}^3$ (шаг сетки $\Delta \lg N_e = 0,25$). Основной вклад в излучение в диапазоне длин волн около $13,5$ нм дают ионы с 5 по 15.

Для расчетов таблиц радиационных характеристик плазмы олова используется база данных конфигураций с максимальным главным квантовым числом $n_{\max} = 6$. Конфигурации, положение линий и силы осцилляторов для максимального числа ионов и всех кратностей ионизации вычислены в приближении свободного среднего атома. Далее с помощью программы FAS были уточнены положение и силы осцилляторов для наиболее вероятных конфигураций ионов всех кратностей. С помощью программы CATS [25] проведено уточнение линий и сил осцилляторов на экспериментальные данные. Для усреднения линий по методике RUSAM используется неравномерная сетка по энергии фотонов с выделением основных особенностей спектра.

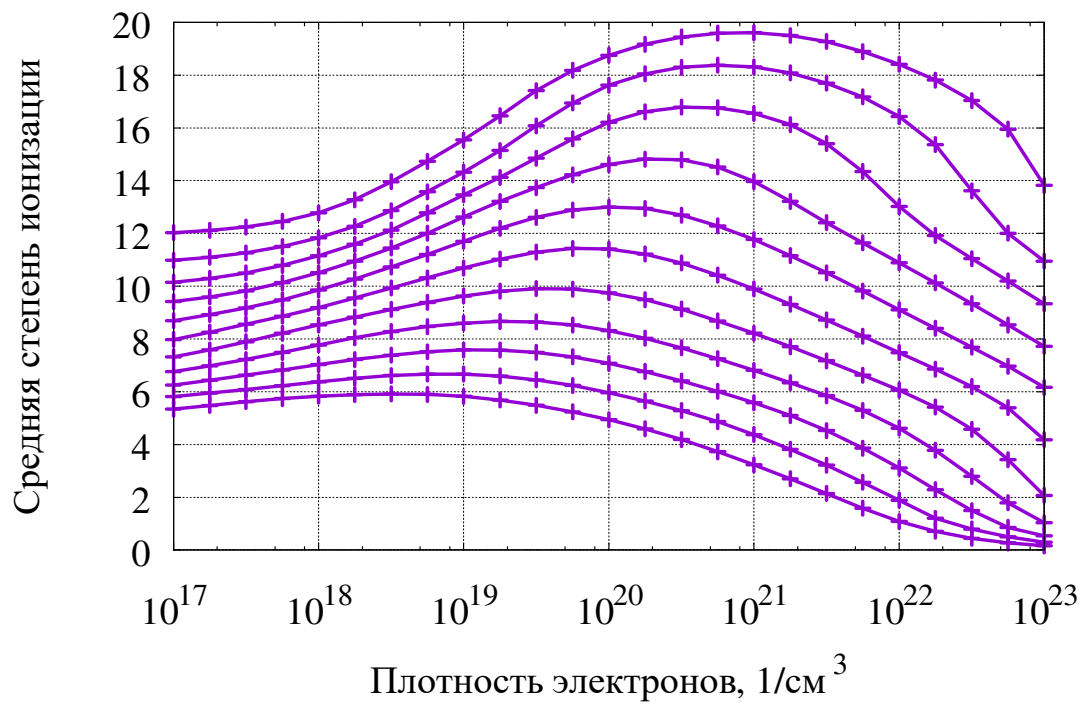


Рис. 7. Средняя степень ионизации оптически прозрачной плазмы олова при температурах от 10 до 100 эВ и разных плотностях

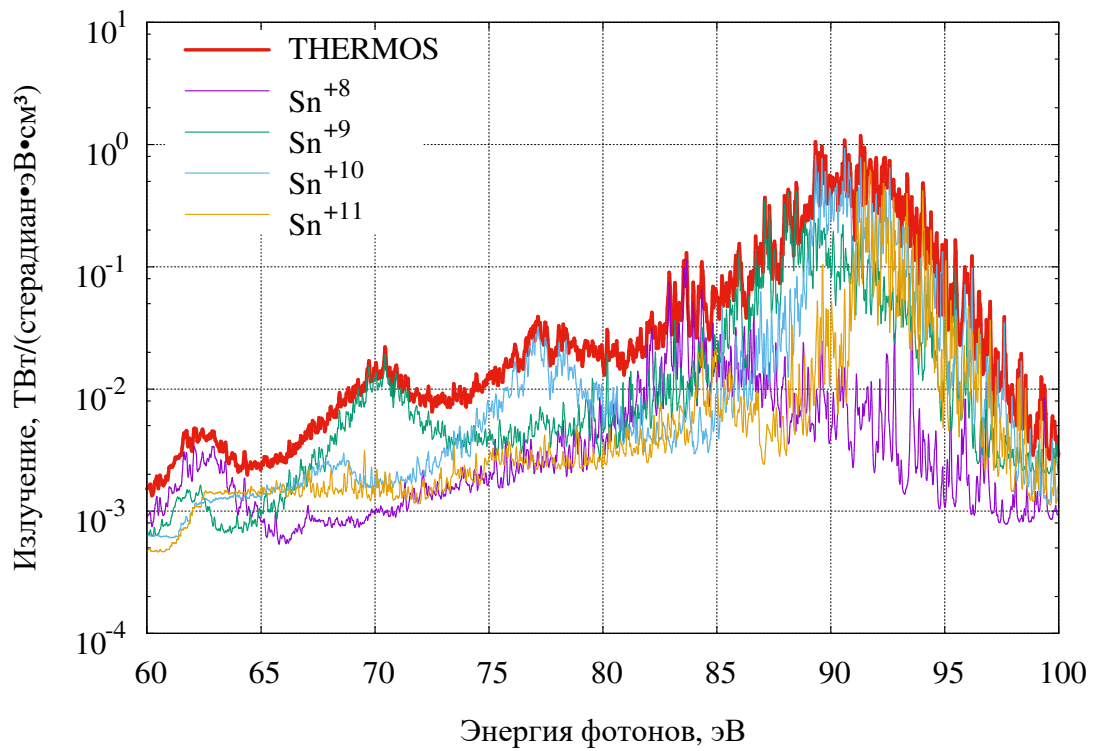


Рис. 8. Спектр излучения прозрачной плазмы олова при температуре 30 эВ и плотности электронов 10^{21} $1/\text{cm}^3$. Выделены вклады наиболее вероятных кратностей ионизации

На рис. 8 приведено излучение прозрачной плазмы олова при температуре 30 эВ и плотности электронов 10^{21} 1/см³. Средняя степень ионизации плазмы при этих условиях $Z_0 = 9,9$. На графике также отмечены вклады в излучение для наиболее вероятных ионов (см. рис. 9) с 8 по 11.

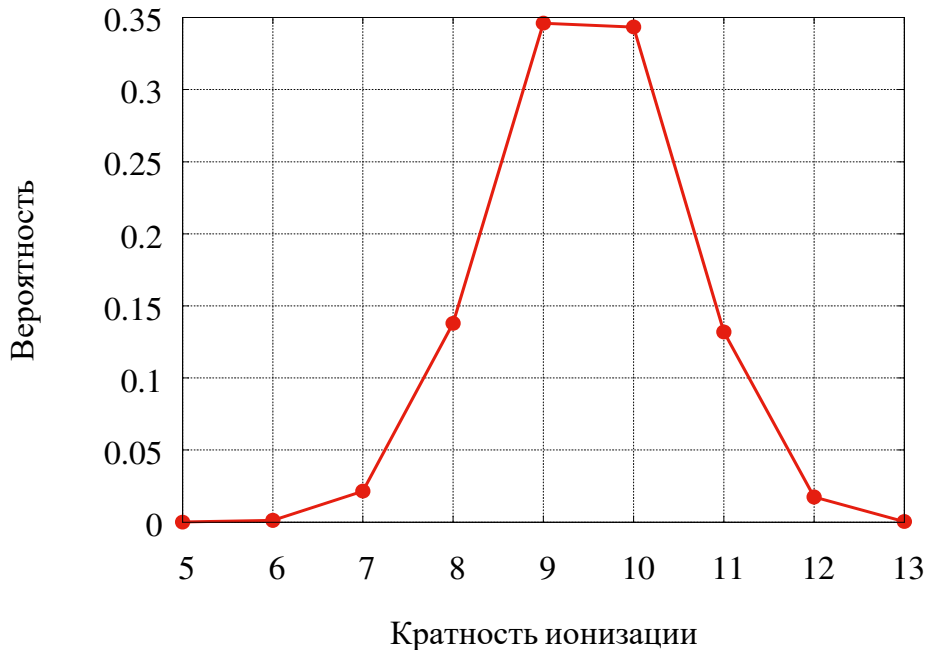


Рис. 9. Распределение по кратностям ионизации в прозрачной плазме олова при температуре 30 эВ и плотности электронов 10^{21} 1/см³

На рис. 11 приведен спектр излучения иона Sn^{+10} в прозрачной плазме при температуре 30 эВ и плотности электронов 10^{21} 1/см³. Выделены вклады наиболее сильных линий, соответствующих переходам в основное состояние: $4p^5 4d^5 \rightarrow 4p^6 4d^4$, $4d^3 4f^1 \rightarrow 4d^4$ и $4d^3 5p^1 \rightarrow 4d^4$. Как можно видеть из рисунка, массивы линий для каждого из переходов занимают широкий интервал по энергии. Очевидно, что при таком виде спектра очень важно уметь правильно вычислять ширину линий, так как именно линии отвечают за перенос излучения.

Были проведены расчеты ионных ширин линий в ионе Sn^{+10} в двухуровневом приближении для прозрачной плазмы при температуре 30 эВ и плотности электронов 10^{21} 1/см³. На рис. 10 приведены электронное и ионное уширения для основных массивов линий. При этом значения радиационных ширин составляют $\gamma^{rad}(4d^4 \rightarrow 4d^3 5p) = 2,7 \cdot 10^{-5}$, $\gamma^{rad}(4p^6 4d^4 \rightarrow 4p^5 4d^5) = 1,5 \cdot 10^{-4}$ и $\gamma^{rad}(4d^4 \rightarrow 4d^3 4f) = 1,2 \cdot 10^{-4}$ эВ. Как можно видеть из графиков, роль ионного уширения в двухуровневом приближении в плазме олова оказывается несущественной.

Прозрачная плазма олова при плотности электронов $N_e > 10^{19}$ 1/см³ становится неидеальной. Таким образом, необходимо учитывать снижение потенциала и вклад в уширение процессов ионизации при расчетах спектров.

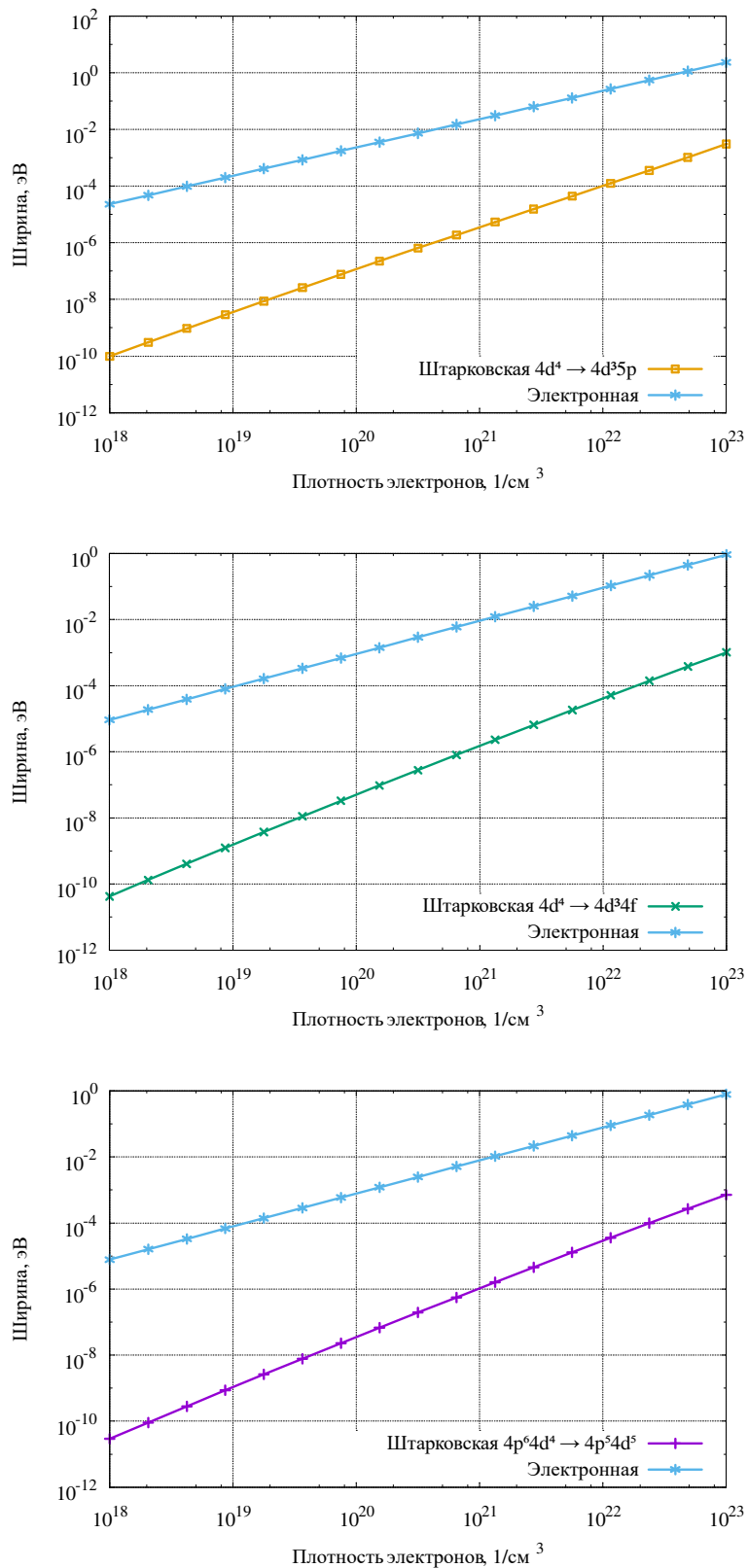


Рис. 10. Электронное и ионное уширение для выделенных линий иона Sn⁺¹⁰ в прозрачной плазме при температуре 30 эВ в зависимости от плотности электронов

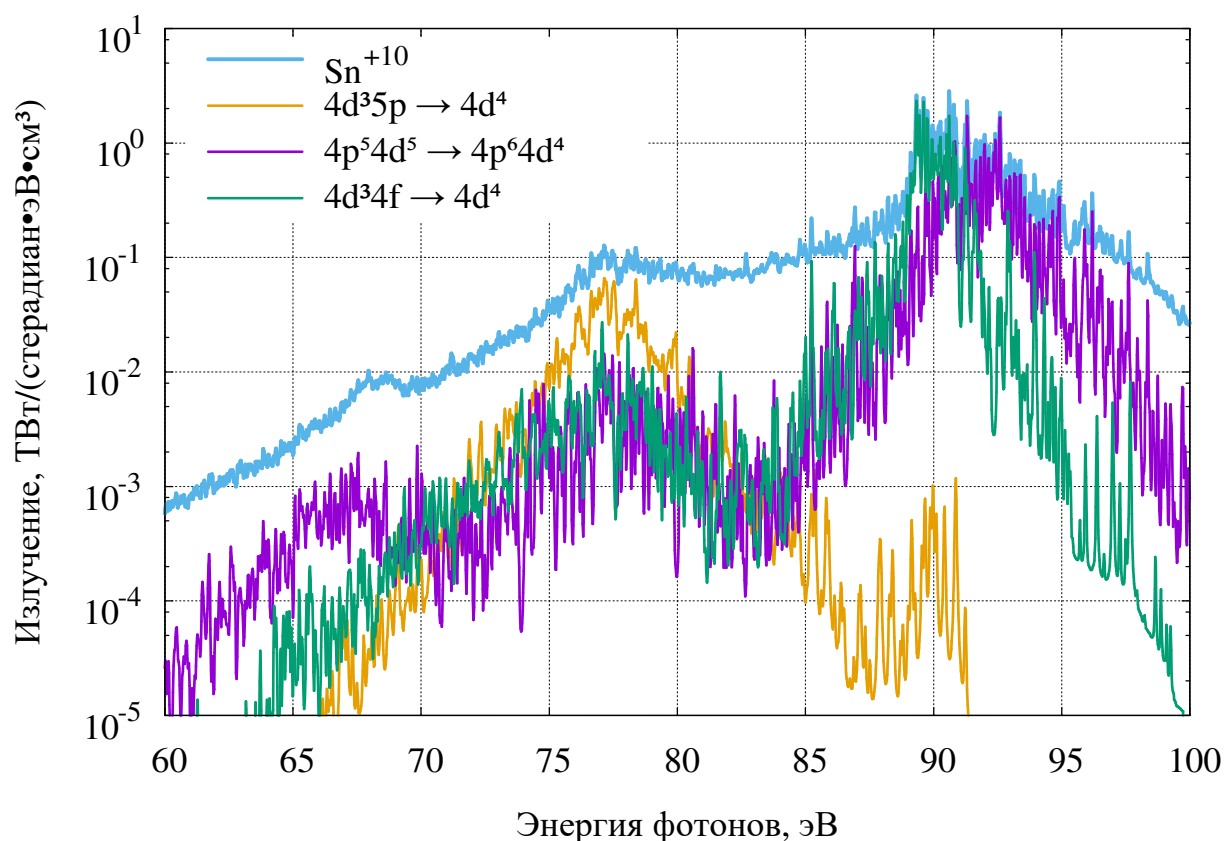


Рис. 11. Спектр излучения иона Sn^{+10} в прозрачной плазме при температуре 30 эВ и плотности электронов 10^{21} 1/см^3 . Выделены вклады наиболее сильных линий

Заключение

Предложенный метод учета Штарк-эффекта может использоваться при расчетах таблиц радиационных свойств плазмы на основе базы данных KIAM_DB для моделирования спектров. При использовании двухуровневого приближения ионное уширение оказалось несущественным, однако необходимо сказать, что при вычислении микрополя использовались средняя степень ионизации плазмы и радиус ячейки «среднего» атома, в то время как в плазме реализуется довольно широкое распределение по степеням ионизации. Понятие «ближайшего» уровня по энергии в данном случае существует только в усредненном виде, поскольку зачастую ближайшие по энергии состояния расщеплены на массивы перекрывающихся уровней энергии. Поэтому в случае подобного спектра для вычисления ионного уширения необходимо решать систему уравнений с учетом расщепления уровней, содержащую все ближайшие по энергии конфигурации. Таким образом, двухуровневое приближение может быть включено в расчеты, но нуждается в верификации в случае сложных спектров, например, методами из [4] или [26].

Литература

1. Вичев И.Ю. et al. KIAM_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы. 2016.
2. Novikov V.G. et al. Calculation of tin emission spectra in discharge plasma: The influence of reabsorption in spectral lines // High Energy Density Phys. 2007. Vol. 3, № 1–2. P. 198–203.
3. Beiersdorfer P. et al. Lineshape measurements of He- β spectra on the ORION laser facility // Phys. Plasmas. AIP Publishing LLC, 2016. Vol. 23, № 10. P. 101211.
4. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Фимин Н.Н. Влияние эффекта Штарка на спектральные характеристики высокотемпературной плазмы // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. 2005. № 21.
5. Rozsnyai B.F. Spectral lines in hot dense matter // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 1977. Vol. 17, № 1. P. 77–88.
6. Новиков В.Г., Соломянная А.Д. Спектральные характеристики плазмы, согласованные с излучением // ТВТ. 1998. Vol. 36, № 6.
7. Kim D.A. et al. The modeling of EUV sources by considering detailed kinetics, including in-line in the gasdynamics calculation // Math. Model. Comput. Simulations. Springer US, 2014. Vol. 6, № 1. P. 46–55.
8. Gu M.F. The flexible atomic code // Can. J. Phys. 2008. Vol. 86, № 5. P. 675–689.
9. Lotz W. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to $Z=108$ // Zeitschrift fur Phys. A Hadron. Nucl. 1970. Vol. 232, № 2. P. 101–107.
10. van Regemorter H. Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres. // Astrophys. J. 1962. Vol. 136. P. 906.
11. Mihalas D. Stellar atmospheres. W.H. Freeman, 1978. 632 p.
12. Абрамов Е.А.; Коган В.И.; Лисица В.С. Перенос излучения в плазме // Вопросы теории плазмы / под ред. Леонтович, М.А.; Кадомцев Б.Б. Москва: Энергоиздат, 1982. P. 114–155.
13. Соломянная А.Д., Вичев И.Ю. Сравнение и анализ спектров плазмы железа (по материалам семинара NLTE9) // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 123. P. 27.
14. Ralchenko Y. NLTE Code Comparison Workshop [Electronic resource]. 2017. URL: <http://nlte.nist.gov/NLTE10/>.
15. Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B. Quantum-statistical models of hot dense matter. Methods for computation opacity and equation of state. Switzerland: Birkhäuser., 2005. 428 p.

16. Novikov V.G. Average Atom Approximation in Non-LTE Level Kinetics. 2016. P. 105–126.
17. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960. 562 p.
18. Bailey J.E. et al. Experimental investigation of opacity models for stellar interior, inertial fusion, and high energy density plasmas // *Phys. Plasmas*. AIP, 2009. Vol. 16, № 5. P. 58101.
19. Moszkowski S.A. On the Energy Distribution of Terms and Line Arrays in Atomic Spectra // *Prog. Theor. Phys. Progress of Theoretical Physics*, 1962. Vol. 28, № 1. P. 1–23.
20. Iglesias C.A., Hooper C.F., DeWitt H.E. Some approximate microfield distributions for multiply ionized plasmas: A critique // *Phys. Rev. A*. American Physical Society, 1983. Vol. 28, № 1. P. 361–369.
21. Nikiforov A.F., Novikov V.G., Solomyannaya A.D. Analytical wave functions in self-consistent field models for high-temperature plasma // *Laser Part. Beams*. 1996. Vol. 14, № 4. P. 765–779.
22. Calisti A., Ferri S., Talin B. Ionization potential depression in hot dense plasmas through a pure classical model. 2014.
23. Bakshi V. EUV Sources for Lithography / ed. Bakshi V. 1000 20th Street, Bellingham, WA 98227-0010 USA: SPIE, 2006.
24. Bakshi V. EUV Lithography (SPIE Press Monograph Vol. PM178). SPIE Publications, 2008.
25. Cowan R.D. Atomic Structure Code [Electronic resource]. URL: <https://www.tcd.ie/Physics/people/Cormac.McGuinness/Cowan/>.
26. Loboda P.A. et al. Line shape modeling of multielectron ions in plasmas // *Laser Part. Beams*. 2000. Vol. 18, № 2. P. S0263034600182175.