



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

Препринты ИПМ • Препринт № 97 за 2021 г.

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

**Д.А. Ким, И.Ю. Вичев,**  
**А.Д. Соломянная, А.С. Грушин**

Моделирование плотной  
алюминиевой плазмы под  
воздействием рентгеновского  
излучения

Статья доступна по лицензии  
Creative Commons Attribution 4.0 International



**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Моделирование плотной алюминиевой плазмы под воздействием рентгеновского излучения / Д.А. Ким [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 97. 15 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-97>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-97>

О р д е н а Л е н и н а  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

Д.А. Ким, И.Ю. Вичев, А.Д. Соломянная,  
А.С. Грушин

Моделирование плотной алюминиевой  
плазмы под воздействием рентгеновского  
излучения

Москва — 2021

*Ким Д.А., Вичев И.Ю., Соломянная А.Д., Грушин А.С.*

## **Моделирование плотной алюминиевой плазмы под воздействием рентгеновского излучения**

С помощью программного комплекса THERMOS были рассчитаны свойства плотной фотоионизированной алюминиевой плазмы. Задача основана на эксперименте, проведённом на установке LCLS, где с помощью лазера на свободных электронах облучалась интенсивным рентгеновским излучением с энергией фотонов 1650 эВ алюминиевая плёнка. Рассматривалась эволюция плазмы алюминия, вычислялись населённости состояний и спектр излучения. Основное внимание уделялось исследованию эффектов, связанных с нестационарностью и снижением потенциалов ионизации из-за высокой плотности, в рамках столкновительно-излучательной модели.

**Ключевые слова:** нестационарная плазма, плотная плазма, столкновительно-излучательное равновесие, лазер на свободных электронах, снижение потенциалов ионизации

*Dmitrii Andreevich Kim, Ilya Yurievich Vichev,  
Anna Dmitrievna Solomyannaya, Alexander Sergeevich Grushin*  
**Simulation of dense aluminum plasma under intense X-rays**

The THERMOS code was used to calculate the properties of dense photoionized aluminum plasma. The case is based on an experiment carried out at the LCLS, where an aluminum film was irradiated with intense X-ray radiation with a photon energy of 1650 eV using a free-electron laser. The evolution of the aluminum plasma was considered, the populations of states and the emission spectrum were calculated. The main attention was paid to the study of the effects associated with nonstationarity and ionization potentials depression due to high density using collisional-radiative model.

**Key words:** non-stationary plasma, dense plasma, collisional-radiative equilibrium, free-electron laser, ionization potential depression

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-01-00485. Вычисления проведены с помощью гибридного суперкомпьютера К-60, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, и МВС-10П (МСЦ РАН).

# Введение

Современные высокоэнергетические установки типа XFEL (X-ray Free Electron Laser – лазер на свободных электронах) позволяют исследовать свойства веществ в различных экстремальных состояниях [1, 2, 3, 4, 5, 6]. Воздействие высокоинтенсивными ультракороткими (десятки и сотни фемтосекунд) пучками рентгеновских фотонов на исследуемые образцы приводит к образованию фотоионизированной плазмы с наличием пустых внутренних электронных оболочек в ионах различной кратности. На установке Linac Coherent Light Source (LCLS) в Стэнфорде (США) исследовалась твердотельная плазма алюминия под воздействием рентгеновского излучения с энергиями фотонов в диапазоне 1500 – 1900 эВ [1, 2]. Измеренные спектры излучения, содержащие линии переходов на *K*-оболочки для ионов различной кратности, дают информацию о структуре энергетических уровней в плазме при высокой плотности, а также о сдвигах порогов фотоионизации.

Экспериментальные данные представляют большой интерес для проверки имеющихся физико-математических моделей, описывающих свойства излучающей плазмы. Численное исследование неравновесной плазмы обычно проводят, используя CR-модели (Collisional-Radiative – столкновительно-излучательные), где решается система уравнений поуровневой кинетики, определяющая населённости квантовых состояний ионов различной кратности. При этом важно, чтобы набор таких состояний имел достаточную для данной задачи детализацию и полноту. Модели чувствительны к положениям энергетических уровней, значениям сил осцилляторов, сечений элементарных процессов и порогов фотоионизации с учётом плотностных эффектов. При ультракоротких воздействиях рентгеновскими пучками необходимо использовать нестационарную CR-модель, так как имеется сильная зависимость от поля излучения.

В ИПМ им. М.В. Келдыша РАН был разработан программный комплекс THERMOS, позволяющий вычислять волновые функции и энергии квантовых состояний электронов в атоме с помощью модели Хартри-Фока-Слэттера (ХФС) в приближениях среднего атома и изолированного иона [7]. Населённости основных и возбуждённых состояний, а также спектры поглощения и излучения могут быть рассчитаны либо по модели Саха-Больцмана в приближении термодинамического равновесия, либо, в случае отсутствия равновесия, с использованием CR-модели в зависимости от физической постановки задачи [8]. В данной работе мы хотим продемонстрировать возможности комплекса THERMOS [7, 9] по моделированию плотной нестационарной фотоионизированной плазмы алюминия на примере одной из задач, рассмотренных на международном семинаре The 10th NLTE Code Comparison Workshop (далее NLTE10) [10]. Задача была основана на экспериментальных данных, полученных на установке LCLS, однако имеет упрощённую постановку, не учитывающую ряд физических процессов,

отвечающих за нагрев и неоднородность плазмы. Такой подход позволяет эффективно сравнить используемые CR-модели и коды на их основе, созданные в ведущих научных организациях мира, что, очевидно, полезно для их дальнейшего развития и усовершенствования [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18].

## Постановка задачи и используемая модель

На семинаре NLTE10 в качестве одной из задач было предложено численно определить эволюцию населённостей и спектр излучения в плазме алюминия с твердотельной плотностью под воздействием высокоинтенсивного монохроматического рентгеновского излучения с энергией фотонов 1650 эВ. Длительность воздействия составляет 80 фс. Для проведения расчётов были выбраны определённые параметры внешнего рентгеновского излучения, соответствующие эксперименту (см. табл. 1). Плотность ионов задана постоянной  $n_i = 6 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

**Таблица 1**

**Параметры рентгеновского излучения**

Энергия фотонов, эВ	1650
Ширина, эВ	4,4
Полная интенсивность, ПВт/см <sup>2</sup>	93,4
Интенсивность, Дж/см <sup>2</sup> /с/Гц/ср	6,99
Длительность, фс	80

Организаторами семинара была предоставлена временная зависимость температуры электронов  $T(t)$ , полученная с помощью кода FLYCHK [19] при заданных параметрах (см. рис. 1).

В неравновесной плазме для определения населённостей  $x_{ks}$  ионов кратности  $k$  в квантовом состоянии  $s$  в каждый момент времени  $t$  необходимо решать нестационарную систему уравнений поуровневой кинетики:

$$\begin{aligned} \frac{dx_{ks}}{dt} &= \psi_{ks}(\vec{x}) - \varphi_{ks} \times x_{ks}, \\ \sum_{ks} x_{ks} &= 1, \quad \sum_{ks} kx_{ks} = Z_0, \quad k = 0 \dots Z, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned}
\psi_{ks}(\vec{x}) &= \sum_{s' < s} \alpha_{ks' \rightarrow ks}^{ex/abs} \times x_{ks'} + \sum_{s' > s} \alpha_{ks' \rightarrow ks}^{dex/em} \times x_{ks'} + \\
&+ \sum_{s'} \alpha_{k-1s' \rightarrow ks}^{ion/phi/ai} \times x_{k-1s'} + \sum_{s'} \alpha_{k+1s' \rightarrow ks}^{rec/phr/dr} \times x_{k+1s'}, \\
\varphi_{ks} &= \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k+1s'}^{ion/phi/ai} + \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k-1s'}^{rec/phr/dr} + \\
&+ \sum_{s' < s} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{dex/em} + \sum_{s' > s} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex/abs},
\end{aligned}$$

где  $Z_0$  – средний заряд,  $Z$  – заряд ядра,  $\alpha$  – скорости радиационных или столкновительных элементарных процессов. Учитываются процессы, приводящие к изменению заряда иона (столкновительная ионизация (*ion*) и трёхчастичная рекомбинация (*rec*), фотоионизация (*phi*) и фоторекомбинация (*phr*), автоионизация (*ai*) и диэлектронная рекомбинация (*dr*)) и не изменяющие заряд иона (столкновительные возбуждение (*ex*) и гашение (*dex*), фотопоглощение (*abs*) и излучение (*em*)).

Для скоростей элементарных процессов использовались известные приближения, а именно: формула Лотца [20] для столкновительной ионизации, формула Ван Режемортера [21, 22] для столкновительного возбуждения, формула Крамерса [23, 24] для фотоионизации, формула из [25] для диэлектронной рекомбинации.

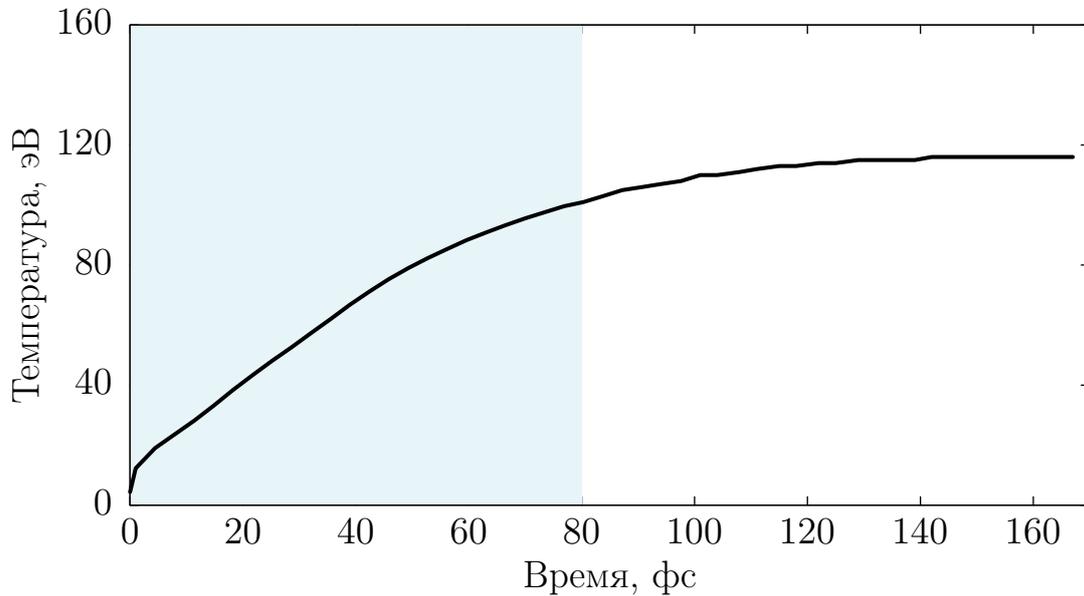


Рис. 1. Зависимость температуры электронов в плотной плазме алюминия от времени при воздействии рентгеновским излучением с энергией фотонов 1650 эВ и длительностью 80 фс. Расчёт проведен с помощью кода FLYCHK [19]

В комплексе THERMOS имеется модуль, позволяющий решать задачи в стационарном ( $dx_{ks}/dt = 0$ ) приближении столкновительно-излучательного равновесия (CRE – Collisional-Radiative Equilibrium). Это даёт существенный

выигрыш во времени счёта, однако, если характерные времена изменения внешних параметров задачи меньше или сопоставимы с характерными временами упомянутых выше элементарных процессов, необходимо решать нестационарные уравнения кинетики [26]. С недавнего времени в комплекс THERMOS включён модуль для решения нестационарной системы уравнений (1) с использованием численной схемы, предложенной в [27].

Зная населённости в каждый момент времени, можно определить интегральный по времени спектр радиационных потерь по формуле

$$J_\omega = 4\pi \int j(\omega, t) dt, \quad (2)$$

где спектральная излучательная способность

$$j(\omega, t) = n_i \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^3 c^2} \left\{ \sum_{ks'} x_{ks'}(t) \sum_{ks} \sigma_{ks', ks}^{\text{bb}}(\omega) + \sum_{ks'} x_{ks'}(t) n(\varepsilon) \sigma_{ks'}^{\text{fb}}(\omega) + e^{-\omega/T} \sigma^{\text{ff}}(\omega) \right\},$$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$  – постоянная Планка,  $c$  – скорость света,  $\sigma^{\text{bb}}$ ,  $\sigma^{\text{fb}}$ ,  $\sigma^{\text{ff}}$  – сечения поглощения в линиях, сечения фотоионизации и сечение тормозного поглощения, соответственно,  $\omega$  – энергия фотонов,  $n(\varepsilon)$  – функция распределения Ферми-Дирака свободных электронов с энергией  $\varepsilon = \omega - \varepsilon_{nl}^{\text{IPD}}$ ,  $\varepsilon_{nl}^{\text{IPD}}$  – потенциал ионизации уровня  $nl$ , в конфигурации  $ks$  с учётом плотностных эффектов.

Важнейшим аспектом данной задачи является наличие плотностных эффектов, таких как уширение спектральных линий, сдвиг границы непрерывного спектра и, соответственно, снижение потенциалов ионизации. В данной работе мы рассматриваем два известных приближения для определения величины снижения потенциалов ионизации  $\Delta I^{\text{IPD}}$  (IPD – Ionization Potential Depression), Экера-Кролла (ЕК) [28] и Стюарта-Пьятта (SP) [29]. Оба приближения достаточно просты и дают оценку величины  $\Delta I^{\text{IPD}} \sim \frac{1}{r_0}$ , где

$r_0 = 1,388 \left( \frac{A}{\rho} \right)^{1/3}$  – радиус электронейтральной атомной ячейки,  $A$  – атомный вес,  $\rho$  – плотность вещества. При этом, как правило, приближение Экера-Кролла даёт несколько большее снижение потенциала ионизации, и в данной задаче это приводит к существенному отличию в спектрах излучения.

Кроме того, в данной работе мы учитываем сглаживание и уширение порогов фотоионизации, используя формулу:

$$\tilde{\sigma}_{nl}^{\text{fb}}(\omega) = \sigma_{nl}^{\text{fb}}(\omega) \cdot \frac{1}{2} \left( 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\omega - \varepsilon_{nl}^{\text{IPD}}}{\Delta I^{\text{IPD}}} \right) \right), \quad (3)$$

где  $\text{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$  – функция ошибок. На рис. 2 приведена зависимость сечения фотоионизации от энергии фотонов для иона алюминия  $\text{Al}^{3+}$  при температуре  $T = 12$  эВ и плотности  $\rho = 2,7$  г/см<sup>3</sup>. Расчёт проведён с помощью кода THERMOS с учётом и без учёта уширения по формуле (3). Ширина размывания порога явным образом зависит от величины сдвига  $\Delta I^{IPD}$ , который возрастает с повышением плотности.

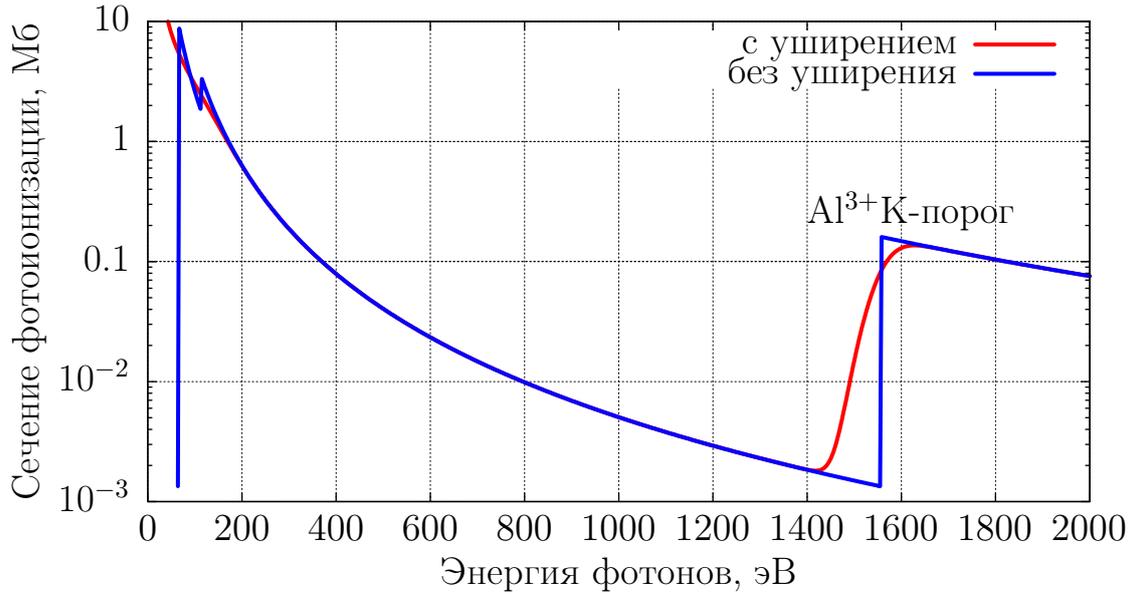


Рис. 2. Сечение фотоионизации иона алюминия  $\text{Al}^{3+}$  при температуре  $T = 12$  эВ и плотности  $\rho = 2,7$  г/см<sup>3</sup>

Волновые функции, энергетический спектр, потенциалы ионизации, силы осцилляторов и сечения были вычислены с помощью кода THERMOS по модели ХФС в приближении изолированного иона с учётом возможной реализации состояний с незаполненными  $K$ -оболочками. Полученные данные были сверены с расчётами по коду FAC [30] и открытой базой NIST [31]. Потенциалы ионизации корректировались с учётом выбранной модели IPD. Для обоих случаев, SP и EK, снижение потенциалов ионизации при данной плотности приводит к исчезновению состояний с главным квантовым числом  $n > 2$  для всех ионов с кратностью заряда от 3 до 8. Для ионов с кратностью выше 8 в некоторые моменты времени появляются состояния с  $n = 3$ , но населённости их крайне малы и не влияют на итоговый спектр.

В рассматриваемой упрощённой постановке задачи плазма не имеет размера, соответственно, не учитываются эффекты, связанные с неоднородностью по пространству и нелокальностью перепоглощения фотонов. Учёт этих эффектов возможен при совместном решении системы уравнений поуровневой кинетики и уравнения переноса излучения в определенной геометрии. В программном комплексе THERMOS реализована такая возможность [9, 32], однако цель данной работы состоит в том, чтобы провести сравнение населённостей и спектра

излучения, полученных с использованием нестационарной CR-модели с учётом плотностных эффектов на заданном поле излучения отдельно от эффектов, связанных с переносом излучения. Также не учитываются сложные процессы, определяющие нагрев плазмы рентгеновским излучением (зависимость  $T(t)$  задана) и влияние горячих электронов.

## Результаты расчётов и обсуждения

В рассматриваемом случае плотностные эффекты играют определяющую роль при моделировании населённостей и спектральных свойств плазмы. На рис. 3 показаны значения энергий, соответствующих  $K$ -порогам фотоионизации ионов алюминия разной кратности, рассчитанные по моделям SP, EK и без учёта IPD. Величина снижения потенциалов ионизации  $1s$ -оболочки пробегает значения от 54 до 175 эВ для ионов алюминия  $Al^{3+} - Al^{8+}$ . Причём для рассматриваемых моделей IPD имеется достаточно сильное расхождение, например для иона  $Al^{6+}$  отличие составляет около 40 эВ. Видно, что воздействие рентгеновского излучения с энергией фотонов 1650 эВ может приводить к прямой фотоионизации  $K$ -электрона для ионов  $Al^{3+}$ ,  $Al^{4+}$  и  $Al^{5+}$  в случае SP, а в случае EK понижение порогов фотоионизации сильнее, и возможна также фотоионизация  $K$ -электрона для иона  $Al^{6+}$ .

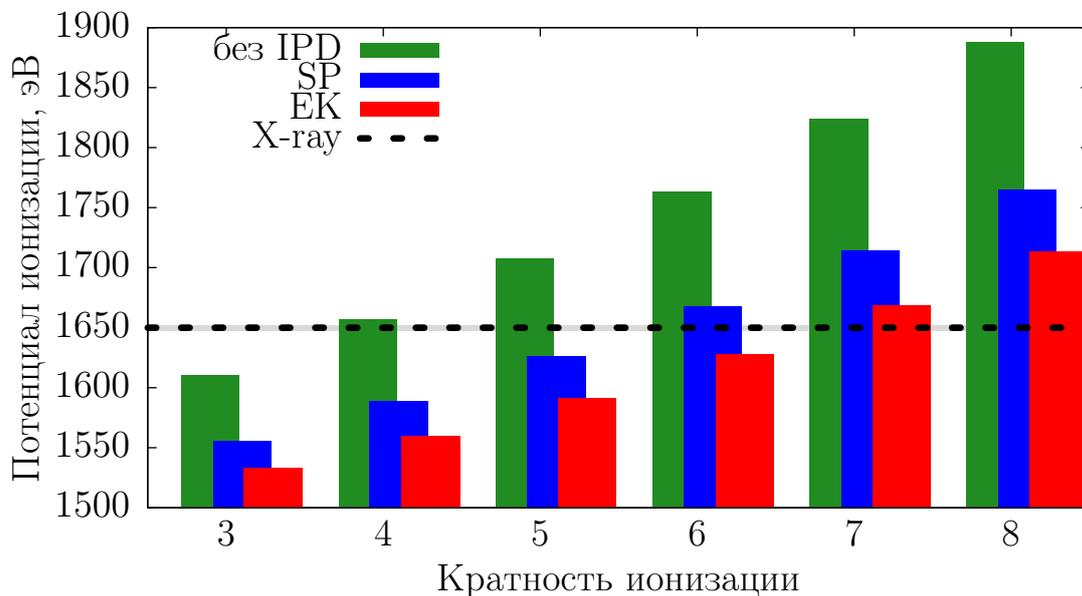


Рис. 3. Потенциалы ионизации  $K$ -электрона для ионов алюминия различной кратности

На рис. 4 представлены временные зависимости среднего заряда, полученные с помощью кода THERMOS с использованием моделей SP, EK и без учёта IPD в сравнении с расчётами других участников NLTE10. Здесь и далее результаты участников семинара NLTE10 приводятся в обезличенном виде серым цветом. Разброс значений среднего заряда объясняется различиями в используемых

физических моделях и наборах атомных данных. В начальный момент времени, когда температура  $T(0) = 4,4$  эВ, THERMOS с использованием моделей SP и EK даёт средний заряд, равный примерно  $Z_0 \approx 3,2$ . При заданной плотности снижение границы непрерывного спектра настолько велико, что остаются только  $K$  и  $L$  оболочки, которые могут вместить суммарно лишь 10 электронов из 13, то есть средний заряд не может быть меньше 3. В целом расчёты среднего заряда по кодам, где учитывается IPD, находятся в хорошем согласии друг с другом как для начального значения, так и в динамике. В одном из кодов, представленных на NLTE10, не учитывалось понижение потенциалов ионизации, и его результат для среднего заряда хорошо согласуется с расчётом по THERMOS без IPD (зеленая кривая). Если IPD не учитывается, средний заряд кардинально отличается. Для холодного алюминия при нормальной плотности расчёт даёт значение около  $Z_0 \approx 0$ , и далее во времени сильно отличается от значений, полученных с учётом IPD. Это физически некорректный результат, он приведён для того, чтобы наглядно продемонстрировать влияние плотностных эффектов.

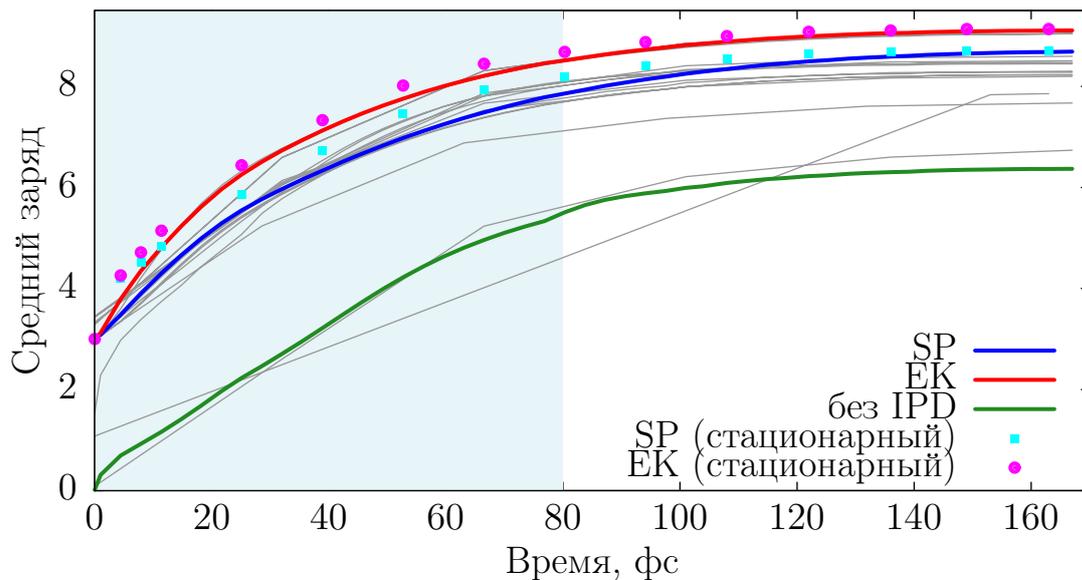


Рис. 4. Временные зависимости среднего заряда, полученные с помощью кода THERMOS с использованием стационарной и нестационарной CR-моделей с учётом IPD и без в сравнении с аналогичными расчётами участников семинара NLTE10 (серые кривые)

Точками на рис. 4 представлены значения среднего заряда, полученные с помощью стационарной версии THERMOS. Каждая точка — результат расчёта при заданных плотности, поле излучения и температуре, соответствующих данному моменту времени. Результаты для среднего заряда, вычисленные в стационарном приближении, не сильно отличаются от нестационарных как в случае SP, так и в случае EK. В обоих приближениях суммарные скорости ионизации для ионов различной кратности составляют величины порядка  $10^{14} - 10^{15} \text{ с}^{-1}$ , то есть характерные времена этих процессов не превышают

десятков фемтосекунд, что видно из рис. 4, где средний заряд увеличивается на  $\Delta Z_0 = 1$  примерно за 10 – 20 фс. Однако за счёт наличия более медленных процессов значения среднего заряда, вычисленные в нестационарном приближении, оказываются примерно на 0,1 – 0,5 ниже.

При заданных условиях большой плотности и высокой интенсивности внешнего рентгеновского излучения скорости столкновительной ионизации, автоионизации и фотоионизации конкурируют. Со временем столкновительная ионизация начинает преобладать за счёт увеличения числа свободных электронов и понижения границы непрерывного спектра. Начиная с иона  $Al^{6+}$  для случая SP и  $Al^{7+}$  для случая EK суммарная скорость фотоионизации резко падает, так как становится невозможным процесс фотоионизации  $K$ -электрона при заданном значении энергии фотонов внешнего рентгеновского излучения. За процессом фотоионизации  $K$ -электрона следует либо Оже-распад, либо радиационный распад с переходом электрона с одного из верхних возбужденных состояний на  $K$ -оболочку. Соответственно, на спектрах излучения наблюдаются яркие линии  $K_\alpha$ , соответствующие ионам  $Al^{4+}$ ,  $Al^{5+}$ ,  $Al^{6+}$  в случае SP, а в случае EK наблюдается также яркая линия  $K_\alpha$ , соответствующая иону  $Al^{7+}$ . На рис. 5 приведены полученные с помощью кода THERMOS интегральные по времени спектры радиационных потерь. Цветные сплошные линии соответствуют расчётам в нестационарном приближении, а пунктирные – в стационарном. Серым цветом обозначены результаты участников семинара NLTE10. Все представленные спектры нормированы на единицу для удобства сравнения. В отличие от значений среднего заряда спектры, рассчитанные по разным кодам, заметно отличаются друг от друга: не совпадают положения и величины уширения спектральных линий, их относительная яркость, сильно варьируется набор слабых линий, соответствующий переходам  $K_\alpha$  ионов кратности выше 7. Причина такого расхождения – использование разных наборов атомных данных в представленных кодах. Однако все коды предсказывают наличие ярких линий  $K_\alpha$  для ионов с кратностями 4, 5, 6, а часть кодов, где, по-видимому, используется модель EK, предсказывают наличие яркой линии  $K_\alpha$  для иона  $Al^{7+}$ . В расчётах, полученных с помощью кода THERMOS с использованием моделей снижения потенциалов ионизации SP и EK, основное отличие в спектрах наблюдается именно для линии  $K_\alpha$  иона  $Al^{7+}$ . В случае EK яркость этой линии выше на порядок, так как состояния с вакансией на  $1s$ -оболочке заполняются в основном за счёт прямой фотоионизации  $K$ -электрона иона  $Al^{6+}$ . В случае SP данная линия тоже присутствует, но яркость её на порядок ниже, так как состояния с вакансией на  $1s$ -оболочке заполняются за счёт менее вероятных процессов, например, по следующей цепочке переходов:  $1s^1 2s^2 2p^4 (Al^{6+*}) \rightarrow$  [ столкновительная ионизация электрона с  $2p$ -оболочки ]  $\rightarrow 1s^1 2s^2 2p^3 (Al^{7+*}) \rightarrow$  [ радиационный распад ]  $\rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2 (Al^{7+})$ .

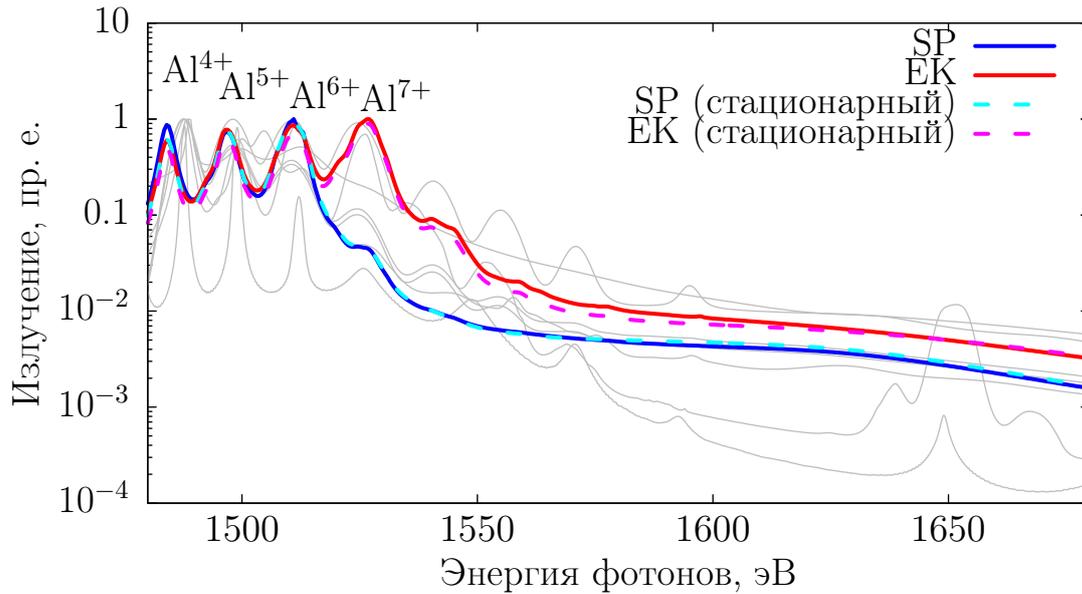


Рис. 5. Интегральные по времени спектральные радиационные потери, рассчитанные с помощью кода THERMOS в различных приближениях в сравнении с результатами участников семинара NLTE10 (серый цвет)

Вычисленные с помощью кода THERMOS в стационарном приближении спектры, также представленные на рис. 5, близки к рассчитанным в нестационарном приближении – относительные яркости линий  $K_\alpha$  для ионов  $\text{Al}^{4+}$ ,  $\text{Al}^{5+}$ ,  $\text{Al}^{6+}$ ,  $\text{Al}^{7+}$  практически совпадают как в случае EK, так и в случае SP.

## Заключение

Из проведенного сравнительного анализа видно, что большинство кодов дают схожие результаты для временной зависимости среднего заряда. Можно разделить используемые модели на 5 групп: нестационарные с применением модели SP, нестационарные с применением модели EK, стационарные с применением модели SP, стационарные с применением модели EK, без учёта IPD. Результаты для среднего заряда, полученные с помощью кода THERMOS для всех вариантов, находятся в хорошем согласии с кодами-участниками семинара NLTE10, разделёнными по соответствующим группам. Для среднего заряда и спектра излучения учёт нестационарности даёт несильное отличие от стационарного решения, так как суммарные скорости ионизации больше или сопоставимы с характерной скоростью изменения температуры. Это важный вывод, позволяющий проводить вычисления населённостей и спектров излучения при заданных условиях, используя упрощённое стационарное приближение, с существенным ускорением счёта при небольших потерях в точности.

Определяющим оказывается выбор модели снижения потенциалов ионизации. Вариант расчёта, не учитывающий IPD, неприменим, так как даёт физически некорректный результат. В работе рассматривались две модели

IPD, Стюарта-Пьятта и Экера-Кролла, которые, несмотря на сходство, дают существенные отличия в предсказаниях. В частности, для иона алюминия  $Al^{6+}$  разница в величине сдвига потенциала ионизации  $K$ -электрона составляет около 40 эВ, что является решающим при моделировании спектра излучения – линия  $K_{\alpha}$  иона  $Al^{7+}$  на порядок ярче в случае ЕК, так как возможна прямая фотоионизация  $K$ -электрона иона  $Al^{6+}$  в отличие от случая SP.

Сравнение спектров излучения, полученных с помощью разных кодов, представленных на семинаре NLTE10, показало существенные отличия результатов от кода к коду. CR-модели чувствительны к выбору набора учитываемых состояний ионов и их детализации, которая определяется в том числе расщеплением уровней за счёт используемого вида связи ( $LS$ ,  $jj$  или промежуточная).

Данная работа показывает, что для полноценного моделирования экспериментов, подобных проведенному на установке LCLS, требуется уточнить столкновительно-излучательную модель, подобрав оптимальный набор учитываемых состояний, а также правильно описать вероятности переходов между ними.

В целом программный комплекс THERMOS позволяет проводить расчёты свойств вещества в экстремальных состояниях с большой плотностью и высокоинтенсивным воздействием рентгеновского излучения, но требуется предварительная работа по составлению корректной базы атомных данных. По результатам данной работы планируется дальнейшее совершенствование кода, что позволит проводить комплексные расчёты в рамках радиационной газовой динамики, где перенос излучения, поуровневая кинетика, потоки вещества и термодинамические величины будут согласованны.

## Библиографический список

1. 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.
2. 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. — Aug. Vol. 109. P. 065002.
3. Young L., Kanter E., Krässig B., et al. Femtosecond electronic response of atoms to ultra-intense X-rays // *Nature*. 2010. Vol. 466, no. 7302. P. 56–61.
4. Nagler B., Zastra U., Fäustlin R., et al. Turning solid aluminium transparent by intense soft X-ray photoionization // *Nature Physics*. 2009. Vol. 5, no. 9. P. 693–696.
5. Waldrop M. M. X-ray science: The big guns // *Nature*. 2014. Vol. 505, no. 7485. P. 604–606.
6. Mimura H., Yumoto H., Matsuyama S., et al. Generation of  $10^{20}$  Wcm<sup>-2</sup> hard X-ray laser pulses with two-stage reflective focusing system // *Nature Communications*. 2014. Vol. 5, no. 1. P. 1–5.
7. 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. P. 428.
8. Ralchenko Yuri. Modern methods in collisional-radiative modeling of plasmas. Springer, 2016. Vol. 90.
9. 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.
10. Ralchenko Yu. The Non-LTE Code Comparison Workshop. URL: <http://nlte.nist.gov/>.
11. 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.
12. 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.

13. 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.
14. 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. P. 225–232.
15. Fontes C. J., Abdallah Jr. 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.
16. 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.
17. 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.
18. Hansen S. B., Chung H.-K., Fontes C. J. et al. Review of the 10th Non-LTE Code Comparison Workshop // *High Energy Density Physics*. 2019.
19. 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.
20. Lotz W. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to  $Z=108$  // *Zeitschrift fur Physik A Hadrons and Nuclei*. 1970. Vol. 232, no. 2. P. 101–107.
21. Van Regemorter H. Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres. // *The Astrophysical Journal*. 1962. Vol. 136. P. 906.
22. Sobel'man I. I., Vainshtein L. A., Yukov E. A. *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1995.
23. 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.
24. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*. М.: Наука, 1966. С. 686.
25. Жданов В.П. Диэлектронная рекомбинация // *Вопросы теории плазмы* / Под ред. М.А. Леонтович, Б.Б. Кадомцев. Москва: Энергоиздат, 1982. С. 79–92.

26. Ким Д.А., Вичев И.Ю., Соломянная А.Д., Грушин А.С. THERMOS: моделирование нестационарной плазмы неона // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 58. С. 16.
27. Belov A. A., Kalitkin N. N., Kuzmina L. V. Modeling of chemical kinetics in gases // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2017. Vol. 9, no. 1. P. 24–39.
28. 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.
29. Stewart J.C., Pyatt K.D. Lowering of Ionization Potentials in Plasmas // *The Astrophysical Journal*. 1966. Vol. 144. P. 1203.
30. Gu M. F. The flexible atomic code // *Can. J. Phys.* 2008. Vol. 86, no. 5. P. 675–689.
31. Ralchenko Yu. Reader J., Kramida A. E. Team NIST ASD. NIST Atomic Spectra Database (version 5.5.6). [Online]. 2018. URL: <http://physics.nist.gov/asd>.
32. 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.

## Оглавление

Введение . . . . .	3
Постановка задачи и используемая модель . . . . .	4
Результаты расчётов и обсуждения . . . . .	8
Заключение . . . . .	11
Библиографический список . . . . .	13