



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

Препринты ИПМ • Препринт № 18 за 2022 г.



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

**И.Ю. Вичев**

Столкновительно-  
излучательная модель  
неравновесной плазмы с  
произвольным полем  
излучения

Статья доступна по лицензии  
Creative Commons Attribution 4.0 International



**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Вичев И.Ю. Столкновительно-излучательная модель неравновесной плазмы с произвольным полем излучения // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 18. 31 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2022-18>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-18>

**О р д е н а Л е н и н а**  
**ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ**  
**имени М.В.Келдыша**  
**Российской академии наук**

**И.Ю. Вичев**

**Столкновительно-излучательная модель**  
**неравновесной плазмы**  
**с произвольным полем излучения**

**Москва — 2022**

**Вичев И.Ю.**

**Столкновительно-излучательная модель неравновесной плазмы с произвольным полем излучения**

Рассмотрена столкновительно-излучательная модель для расчёта радиационных и термодинамических свойств плазмы с произвольным полем излучения. Приведены основные уравнения модели, формулы для расчёта скоростей элементарных процессов, коэффициента поглощения и излучательной способности, а также уравнение состояния вещества. Представлены методы учёта плотностных эффектов, приводящие к снижению потенциалов ионизации. Предложен способ учёта горячих электронов с температурой много больше температуры плазмы.

**Ключевые слова:** столкновительно-излучательная модель, скорости радиационных и столкновительных процессов, снижение потенциалов ионизации, горячие электроны

***Ilya Yurievich Vichev***

**Collisional-radiative model of NLTE plasma with an arbitrary radiation field**

The collisional-radiative model for calculating the radiative and thermodynamic properties of a plasma with an arbitrary radiation field is considered. The basic equations of the model, formulas for calculating the rates of elementary processes, the absorption coefficient and emissivity, as well as the equation of state of matter are given. Methods for describing ionization potential depression in dense plasma are presented. A method is proposed for taking into account hot electrons with a temperature much higher than the plasma temperature.

**Key words:** collisional-radiative model, rates of collisional and radiation processes, ionization potential depression, hot electrons

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-01-00485.

## Введение

Современные исследования в области излучающей плазмы связаны с экспериментами на высокоэнергетических установках (NIF, Z, ITER, European XFEL, LCLS), с астрофизическими наблюдениями, а также промышленным применением, например, в EUV-литографии. Излучение, исходящее от плазмы, является одним из основных источников знаний об её свойствах, в частности о температуре, плотности, зарядовом и химическом составе. Измеренные спектры излучения или прохождения через слой плазмы бывают довольно сложны из-за большого числа спектральных линий. Точность интерпретации спектроскопических данных достигается, в основном, с помощью сложных математических 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 поглощения и излучения является столкновительно-излучательная модель.

История столкновительно-излучательной модели началась в 1960-х годах. Общая постановка проблемы определения коэффициентов рекомбинации и ионизации на основе кинетических уравнений баланса была сформулирована в работах Бейтса, Кингстона и Мак-Уиртера [1, 2]. Исследованиями в этой области в СССР занимались Биберман, Воробьёв и Якубов [3], Беляев и Будкер [4], Питаевский и Гуревич [5, 6, 7].

За прошедшие 60 лет развитие столкновительно-излучательной модели происходило с учётом разных приближений: коронального, двухуровневого, среднего иона [8]. Это стало возможным только благодаря совершенствованию аппарата атомной физики [9, 10] и электронных вычислительных машин (ЭВМ), которые позволили получать решение для уравнений модели в течение приемлемого времени.

Двумя основными конструктивными элементами модели являются критерий выбора списка учитываемых конфигураций и приближения для расчёта скоростей радиационных и столкновительных процессов. Важным аспектом модели является наличие или возможность построения достаточно полного и детализированного набора конфигураций. В общем случае достичь строгой полноты не представляется возможным по причине чрезвычайно большого числа реализуемых конфигураций.

Детализация описания уровней наиболее важна при низких плотностях, где преобладают рекомбинационные процессы, столкновительное уширение невелико, а спектральные линии излучения могут быть измерены с высокой точностью. Такое же поведение наблюдается в слабоионизованной плазме. При относительно высоких плотностях за счёт преобладания столкновительных процессов увеличивается населённость высоковозбужденных состояний – распределение по зарядовым состояниям смещается в сторону локального термодинамического равновесия. Соотношение между требованиями к полноте набора состояний и наличием необходимых вычислительных ресурсов является важной частью искусства

применения столкновительно-излучательной модели для решения задач в физике излучающей плазмы.

Существует много вариантов реализации столкновительно-излучательной модели с различной степенью детализации учитываемых состояний (DLA [11], STA [12], UTA [13], MUTA [14], RTA [15, 16, 17]). Необходимые для расчётов атомные свойства могут быть получены в водородоподобном приближении или с помощью сложных кодов атомной физики, например, RCG [10], FAC [18], HULLAC [19]. Приведём наиболее известные программы, разработанные в ведущих мировых лабораториях – ATOMIC [20, 21, 22] Лос-Аламосская национальная лаборатория (США), SCSF [23] и SCRAM [24, 25] Сандийские национальные лаборатории (США), CRETIN [26] и FLYCHK [27, 28] Ливерморская национальная лаборатория (США), DEDALE [29] Комиссариат по атомной и альтернативным видам энергии (Франция), DLAYZ [30] Оборонный научно-технический университет НОАК (Китай), CRAC Института Вейцмана (Израиль).

В данной работе изложена столкновительно-излучательная модель, а также применяемые приближения и методы для расчёта радиационных и термодинамических свойств плазмы с произвольным полем излучения. Предложенная модель реализована в виде отдельного модуля THERMOS\_CRE [31] и включена в вычислительный комплекс программ THERMOS [32], разрабатываемого в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН в отделе №6 “Вычислительная физика и кинетические уравнения”.

## Формулировка модели

Столкновительно-излучательная модель описывает процессы, которые связывают населённости электронных состояний в атомах и ионах посредством скоростей элементарных радиационных и столкновительных процессов. Система уравнений для вероятности конфигурации иона кратности  $k$  в состоянии  $s$  имеет вид

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

Запишем систему уравнений в матричной форме:

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{X}, \quad (2)$$

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

$$\begin{bmatrix}
A_{00} & R_{01} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
I_{01} & A_{11} & R_{12} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & 0 & I_{k-2,k-1} & A_{k-1,k-1} & R_{k-1,k} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
0 & \dots & 0 & I_{k-1,k} & A_{k,k} & R_{k,k+1} & 0 & \dots & 0 \\
0 & \dots & 0 & 0 & I_{k,k+1} & A_{k+1,k+1} & R_{k+1,k+2} & \dots & 0 \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I_{Z-2,Z-1} & A_{Z-1,Z-1} & R_{Z-1,Z} \\
0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I_{Z-1,Z} & A_{Z,Z}
\end{bmatrix} \quad (3)$$

При этом диагональные блоки матрицы (3) выглядят следующим образом:

$$A_{kk} = \begin{bmatrix} a_{k0,k0} & \dots & a_{k0,ks} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{ks,k0} & \dots & a_{ks,ks} \end{bmatrix}. \quad (4)$$

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

$$a_{ks,ks} = - \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'} - \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'} - \sum_{s'} \alpha_{ks \rightarrow ks'}. \quad (5)$$

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 (3) включают в себя скорости процессов ионизации и рекомбинации соответственно:

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

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  $\alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{dc}$

$$\alpha_{ks \rightarrow k-1, s'} = \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{ir} + \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{phr} + \alpha_{ks \rightarrow k-1, s'}^{dc}. \quad (6)$$

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  $\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ai}$

$$\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'} = \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci} + \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{phi} + \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ai}. \quad (7)$$

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

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'} = \begin{cases} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} + \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{abs}, & \text{если } E_{ks} < E_{ks'}, \\ \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{dex} + \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{em}, & \text{если } E_{ks} > E_{ks'}, \end{cases} \quad (8)$$

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  $U_\omega$  намного меньше скоростей  $\frac{d\mathbf{X}}{dt}$ , то систему уравнений (2) можно решать в стационарном приближении, полагая  $\frac{d\mathbf{X}}{dt} = 0$ :

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = 0. \quad (9)$$

При решении системы (9) сумма вероятностей конфигураций должна удовлетворять условию нормировки:

$$\sum_{ks} x_{ks} = 1, \quad k = 0..Z. \quad (10)$$

Система уравнений (9) и условие (10) лежат в основе модели столкновительно-излучательного равновесия. Которая является обобщением описания как равновесной плазмы, находящейся в условиях локального термодинамического равновесия, так и неравновесной плазмы.

Предлагаемый подход базируется на наборе конфигураций  $Q_{ks}$ , которые определяются целыми числами заполнения нерелятивистских уровней  $N_{nl}^{ks}$ . При расчёте скоростей столкновительных процессов ионизации и рекомбинации по формулам (6) и (7) полагается, что начальные и конечные состояния связаны соотношением  $N_{nl}^{k-1, s'} = N_{nl}^{ks} + 1$ . Скорости процессов без изменения кратности ионизации (8) в описываемой модели рассчитываются только для одноэлектронных дипольных переходов  $\Delta\ell = 1$ , причём  $N_{nl}^{ks'} = N_{nl}^{ks} - 1$ ;  $N_{n'l'}^{ks'} = N_{n'l'}^{ks} + 1$ .

## Выражения для скоростей элементарных процессов

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

Функция распределения свободных электронов по энергиям  $\varepsilon$  при фиксированной температуре  $\theta$  предполагается максвелловской:

$$F(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\varepsilon} \theta^{-3/2} e^{-\varepsilon/\theta}. \quad (11)$$

Число свободных электронов с энергией  $\varepsilon$  удовлетворяет статистике Ферми-Дирака:

$$n(\varepsilon) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \zeta}{\theta}\right) \right]^{-1}, \quad (12)$$

где  $\zeta$  – химический потенциал свободных электронов.

Плотность свободных электронов в атомной ячейке  $n_e$  является постоянной, таким образом, выполняется соотношение [33]:

$$e^{\zeta/\theta} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{\theta} \right)^{3/2} a_0^3 n_e, \quad (13)$$

где  $a_0$  – боровский радиус.

### ***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  $n'l'$ , умноженного на скорость электрона  $v = \sqrt{2\varepsilon}$ :

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} = n_e a_0^3 \nu_0 \langle \sigma_{ks,ks'}^{ex} v \rangle = n_e a_0^3 \nu_0 \int_{\Delta\varepsilon}^{\infty} \sigma_{ks,ks'}^{ex}(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (14)$$

где  $\nu_0$  – атомная единица частоты,  $F(\varepsilon)$  – функция распределения свободных электронов по энергиям. Энергия, необходимая для возбуждения электрона, определяется через энергии соответствующих конфигураций

$$\Delta\varepsilon = E_{ks'} - E_{ks}. \quad (15)$$

В предлагаемой модели при вычислениях скорости столкновительного процесса возбуждения используется формула Режемортера [34, 35]:

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} = \frac{8\pi\sqrt{\pi}}{\sqrt{6}} a_0^3 \nu_0 \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} f_{ks,ks'} \frac{e^{-y}}{y} p(y), \quad y = \frac{\Delta\varepsilon}{\theta} > 0. \quad (16)$$

Здесь  $f_{ks,ks'}$  – сила осциллятора одноэлектронного перехода, значения множителя  $p(y)$  и их аппроксимация приведены в разделе **Численные методы** (см. табл. 1 и рис. 4).



Скорость столкновительного процесса девозбуждения (тушения) вычисляется из скорости возбуждения с помощью принципа детального равновесия [36, 37]:

$$\alpha_{ks' \rightarrow ks}^{dex} = \frac{g_{ks}}{g_{ks'}} e^y \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex}, \quad (17)$$

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

### **Ионизация и трехчастичная рекомбинация**

Формулу для расчёта скорости процесса возбуждения (14) можно распространить на вычисление скорости процесса ионизации при переходе электрона с квантовыми числами  $n\ell$  в непрерывный спектр  $\varepsilon^* \lambda^*$ :

$$\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci} = n_e a_0^3 \nu_0 \int_{\varepsilon^i}^{\infty} \left( \sum_{\lambda^*} \int_0^{(\varepsilon - \varepsilon^i)/2} \frac{d\sigma_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci}}{d\varepsilon^*} (1 - n(\varepsilon^*)) d\varepsilon^* \right) \sqrt{2\varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (18)$$

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

$$\varepsilon^i = E_{k+1, s'} - E_{ks}. \quad (19)$$

Как можно видеть из формулы (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 [38]:

$$\begin{aligned} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci} &= \frac{\sqrt{6} \pi \sqrt{\pi}}{4} a_0^3 \nu_0 \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} N_{nl}^{ks} \frac{1}{\varepsilon^i} \int_{\varepsilon^i/\theta}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt = \\ &= 2,1 \times 10^{-8} \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} N_{nl}^{ks} \frac{E_1(\varepsilon^i/\theta)}{\varepsilon^i}, \end{aligned} \quad (20)$$

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

Для расчёта скорости обратного процесса трехчастичной рекомбинации воспользуемся принципом детального равновесия [36, 37]:

$$\alpha_{k+1, s' \rightarrow ks}^{ir} = \exp\left(\frac{\zeta + \varepsilon^i}{\theta}\right) \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} \alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{ci}. \quad (21)$$

Подставляя выражение (13) в формулу (21), получим

$$\begin{aligned}\alpha_{k+1,s' \rightarrow ks}^{ir} &= \frac{1}{2} \left( \frac{2\pi}{\theta} \right)^{3/2} a_0^3 n_e e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1,s'}} \alpha_{ks \rightarrow k+1,s'}^{ci} = \\ &= 1,17 \times 10^{-24} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1,s'}} \alpha_{ks \rightarrow k+1,s'}^{ci}.\end{aligned}\quad (22)$$

### Автоионизация и диэлектронный захват

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

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

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

Радиационная стабилизация по каналу (а) приводит к связыванию налетающего электрона с ионом, т.е. к рекомбинации, так как после излучения второго фотона ион  $Q^*(ks,nl)$  с одним возбужденным электроном  $nl$  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 рис. 1 представлено схематическое изображение описанных процессов.

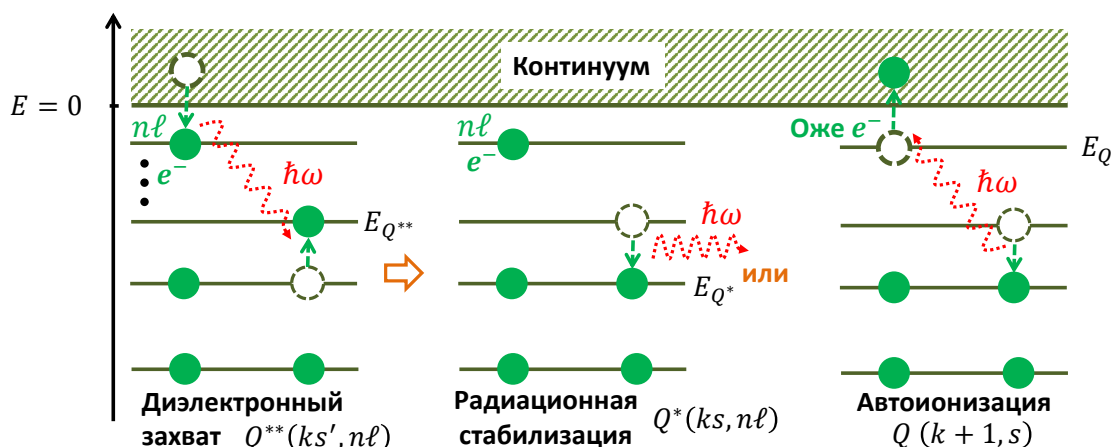


Рис. 1. Схематическое представление процессов

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 [39] имеет вид:

$$\alpha_{nl}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q) = \frac{2\pi\nu_0}{2(2\ell+1)} \frac{f(Q^*, Q^{**})}{\omega(Q^{**}, Q^*)} \times \sum_{\ell'=\ell\pm 1} \frac{\ell+\ell'+1}{2} \left( \left\langle R_{n\ell}(r) \left| \frac{1}{r^2} \right| R_{\varepsilon\ell'}(r) \right\rangle \right)^2, \quad (23)$$

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

При вычислении матричного элемента из (23) используется водородоподобное 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

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q) &= \frac{2\pi\nu_0}{2(2\ell+1)} \frac{f(Q^*, Q^{**})}{\omega(Q^{**}, Q^*)} f^H = \\ &= 1,3 \times 10^{17} \frac{1}{(2\ell+1)} \frac{f(Q^*, Q^{**})}{\omega(Q^{**}, Q^*)} f^H. \end{aligned} \quad (24)$$

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

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^{dc}(Q \rightarrow [Q^*]Q^{**}) &= \exp\left(\frac{\zeta + \varepsilon}{\theta}\right) \frac{g(Q^*)}{g(Q)} \alpha_{nl}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q) = \\ &= 1,17 \times 10^{-24} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon/\theta} \frac{g(Q^*)}{g(Q)} \alpha_{nl}^{ai}(Q^{**}[Q^*] \rightarrow Q). \end{aligned} \quad (25)$$

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

$$\alpha^{ai}(ks' \rightarrow k+1, s) = \sum_{Q^*(ks)} \alpha^{ai}(ks'[ks] \rightarrow k+1, s)|_{\varepsilon>0}. \quad (26)$$

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

$$\alpha^{dr}(k+1, s \rightarrow ks') = \sum_{Q^*(ks)} \frac{\alpha^{em}(ks' \rightarrow ks) \alpha^{dc}(k+1, s \rightarrow [ks]ks')}{\alpha^{em}(ks' \rightarrow ks) + \alpha^{ai}(ks'[ks] \rightarrow k+1, s)}. \quad (27)$$

## Скорости радиационных процессов

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

$$\alpha_{ks \rightarrow ks'}^{abs} = \nu_0 \int \frac{\sigma_{ks,ks'}^{bb} \Phi_{ks,ks'}(\omega)}{\omega} (cU_\omega) d\omega, \quad (28)$$

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

$$\sigma_{ks,ks'}^{bb} = 2\pi^2 \alpha f_{ks,ks'}. \quad (29)$$

Спектральная плотность энергии излучения определяется как

$$U_\omega = \frac{1}{c} \int I_\omega d\Omega, \quad (30)$$

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

Спектральную плотность энергии излучения также можно представить в виде

$$U_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} W(\omega) = \frac{4\pi}{c} \frac{15}{\pi^5} \sigma \omega^3 W(\omega), \quad (31)$$

где  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  – постоянная Планка,  $W(\omega)$  – спектральная плотность фотонов. Если  $\sigma$  выражена в ТВт/(см<sup>2</sup> × ЭВ<sup>4</sup>), 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 (28) получаем:

$$\alpha_{ks' \rightarrow ks}^{em} = \nu_0 \frac{g_{ks}}{g_{ks'}} \exp\left(\frac{E_{ks'} - E_{ks}}{\theta}\right) \int \frac{\sigma_{ks,ks'}^{bb} \Phi_{ks,ks'}(\omega)}{\omega} \left(\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2} + cU_\omega\right) e^{-\omega/\theta} d\omega. \quad (32)$$

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

$$\begin{aligned} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{abs} &= \nu_0 2\pi^2 \alpha f_{ks,ks'} \left(\frac{\nu_0 a_0}{\pi c}\right)^2 \omega_0^2 W(\omega_0) \\ &= 3,21 \times 10^{10} f_{ks,ks'} \omega_0^2 W(\omega_0), \end{aligned} \quad (33)$$

$$\alpha_{ks' \rightarrow ks}^{em} = 3,21 \times 10^{10} \frac{g_{ks}}{g_{ks'}} f_{ks,ks'} \omega_0^2 [1 + W(\omega_0)]. \quad (34)$$

Аналогично запишем формулы для скоростей фотоионизационных и фоторекомбинационных процессов:

$$\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{phi} = \nu_0 \int \frac{\sigma_{nl}^{bf}(\omega)}{\omega} (cU_\omega) d\omega,$$

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

где  $\varepsilon^i$  – энергия ионизации, определяемая по формуле (19).

В водородоподобном приближении сечение процесса фотоионизации (в а.е.) с уровня  $nl$  и эффективным зарядом ядра  $Z_{nl}$  может быть записано в виде [40]:

$$\sigma_{nl}^{bf}(\omega) = \frac{64\pi}{3\sqrt{3}} \alpha \frac{n}{Z_{nl}^2} \left(\frac{\varepsilon^i}{\omega}\right)^3. \quad (35)$$

Обобщим водородное приближение на случай многозарядных ионов, тогда формула Крамерса (35) может быть представлена в виде

$$\sigma_{nl}^{bf}(\omega) = \frac{64\pi}{3\sqrt{6}} \alpha \frac{Z_{nl} (\varepsilon^i)^{3/2}}{2n^2} \frac{1}{\omega^3} \Big|_{\omega \geq \varepsilon^i}. \quad (36)$$

При вычислениях скоростей процессов фотоионизации и фоторекомбинации используется формула (36), где  $Z_{nl} \equiv Z_{nl}^{(k)}$  – эффективный заряд уровня  $nl$  для иона заданной кратности  $k$ .

Тогда для скорости процесса фотоионизации получаем следующее выражение:

$$\alpha_{ks \rightarrow k+1, s'}^{phi} = u_{nl} \int_{\varepsilon^i/\theta}^{\infty} \frac{W(t)}{t} dt, \quad (37)$$

где

$$u_{nl} = \nu_0 \frac{64\pi}{3\sqrt{6}} \alpha \left(\frac{\nu_0 a_0}{\pi c}\right)^2 \frac{Z_{nl}^{(k)} (\varepsilon^i)^{3/2}}{2n^2} =$$

$$= 4,45 \times 10^{10} \frac{Z_{nl}^{(k)} (\varepsilon^i)^{3/2}}{2n^2}.$$

Соответственно, скорость процесса фоторекомбинации вычисляется следующим образом:

$$\alpha_{k+1, s' \rightarrow ks}^{phr} = \nu_0 \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{\theta}\right)^{3/2} a_0^3 n_e e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} u_{nl} \int_{\varepsilon^i}^{\infty} \frac{e^{-\omega/\theta}}{\omega} [1 + W(\omega)] d\omega =$$

$$= 1,17 \times 10^{-24} \frac{n_e}{\theta^{3/2}} e^{\varepsilon^i/\theta} \frac{g_{ks}}{g_{k+1, s'}} u_{nl} \int_{\varepsilon^i/\theta}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} [1 + W(t)] dt. \quad (38)$$

## Коэффициент поглощения и излучательная способность

Из решения системы (9) для фиксированных температуры электронов  $\theta$ , плотности ионов  $n_i$  и спектральной плотности энергии излучения  $U_\omega$  определяются вероятности состояний ионов  $x_{ks}$  и средний заряд  $Z_0 = \sum_{ks} kx_{ks}$ .

Спектральные коэффициент поглощения и излучательная способность могут быть записаны в виде

$$\kappa_\omega = n_i \left\{ (1 - e^{-\omega/\theta}) \left[ \sum_{ks} x_{ks} \sum_{ks'} \sigma_{ks,ks'}^{bb}(\omega) \Phi_{ks,ks'}^{abs}(\omega) + \sum_{ks} x_{ks} \sigma_{ks}^{bf}(\omega) + \sigma^{ff}(\omega) \right] + \sigma^{cs}(\omega) \right\}, \quad (39)$$

$$j_\omega = n_i \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^3 c^2} \left\{ \sum_{ks'} x_{ks'} \sum_{ks} \sigma_{ks',ks}^{bb}(\omega) \Phi_{ks',ks}^{em}(\omega) + \sum_{ks'} x_{ks'} \sigma_{ks'}^{fb}(\omega) + e^{-\omega/\theta} \sigma^{ff}(\omega) \right\}, \quad (40)$$

где  $\Phi(\omega)$  – форма спектральной линии,  $\sigma^{bb}(\omega)$ ,  $\sigma^{bf}(\omega)$ ,  $\sigma^{ff}(\omega)$ ,  $\sigma^{cs}(\omega)$  – сечения процессов поглощения в линиях (29), фотоионизации, тормозного поглощения и комптоновского рассеяния соответственно.

### Форма спектральной линии

При излучении и поглощении происходит полное перераспределение по частотам внутри спектральной линии, поэтому можно считать  $\Phi_{ks,ks'}^{abs}(\omega) = \Phi_{ks',ks}^{em}(\omega) = \Phi_{ks,ks'}(\omega)$ .

Форма спектральной линии, которая одновременно включает эффекты, влияющие на время жизни уровня, и смещение положения центра спектральной линии, описывается профилем Фойгта [41]:

$$\Phi_{ks,ks'}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}D} K \left( \frac{\omega - \omega_{ks,ks'}}{D}, \frac{\Gamma}{D} \right), \quad (41)$$

где  $\omega_{ks,ks'} = E_{ks'} - E_{ks}$  – положение центра спектральной линии,  $\Gamma = \Gamma_{ks,ks'}$  – лоренцовская полуширина спектральной линии [33],  $D$  – гауссова ширина спектральной линии.

Гауссова ширина включает в себя Доплер-эффект, уширение спектральных линий за счёт эффективного учёта спин-орбитального взаимодействия и сеточное уширение:

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

Уширение линии за счёт эффекта Доплера в плазме с температурой  $\theta$  определяется как

$$\sigma^D = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{2\theta}{M}}, \quad (42)$$

где  $M = 1836 A$  – масса иона.

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  $\sigma^{jj}$  вычисляется с использованием статистического приближения Мошковского [42].

Лоренцевская ширина спектральной линии  $\gamma = 2\Gamma$  в формуле (41) включает в себя 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

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

Время жизни конфигурации  $Q_{ks}$  определяется суммой скоростей радиационных процессов возбуждения и распада во всевозможные 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 [43, 44].

### **Сечение фотоионизации**

Для сечения процесса фотоионизации удобно воспользоваться простым приближением Крамерса [40] (см. формулу (36)). Тогда сечение фотоионизации электрона с энергией  $\varepsilon^i$  (19) из состояния  $ks$  с числами заполнения  $N_{nl}^{ks}$  определяется так:

$$\sigma_{ks}^{\text{bf}}(\omega) = \sum_{nl} N_{nl}^{ks} [1 - n(\omega - \varepsilon^i)] \sigma_{nl}^{\text{bf}}(\omega). \quad (43)$$

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

$$\sigma_{ks'}^{\text{fb}}(\omega) = \sum_{nl} [2(2l + 1) - N_{nl}^{ks'}] n(\omega - \varepsilon^i) \sigma_{nl}^{\text{bf}}(\omega). \quad (44)$$

### **Сечение тормозного поглощения**

Выражение для сечения тормозного поглощения имеет вид [33]:

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

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

Сечение процесса тормозного поглощения будем рассматривать в приближении Борна-Эльверта [45] с учётом вырождения:

$$\sigma^{\text{ff}}(\omega) = \frac{16\pi}{3\sqrt{3}} \alpha a_0^2 \frac{Z_0^2}{\omega^3} \int_0^{\infty} n(\varepsilon) [1 - n(\varepsilon')] g(\varepsilon', \varepsilon) d\varepsilon, \quad (45)$$

где

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

### **Сечение комptonовского рассеяния**

Для расчёта сечения процесса комptonовского рассеяния используется аппроксимационная формула [46], основанная на формуле Клейна-Нишины и на результатах, приведённых в работе [47]:

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

где  $\omega$  – энергия фотона,  $T$  – температура вещества (здесь  $\omega$  и  $T$  выражены в кэВ),

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



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

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

## Уравнение состояния

При расчёте уравнения состояния используется приближение идеального газа:

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

$$P = P_e + P_i = \frac{\theta}{v}(Z_0 + 1), \quad (46)$$

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

$$E = E_e + E_i = \left[ \frac{3}{2}\theta (Z_0 + 1) + \sum_{ks} x_{ks} E_{ks} - E_0 \right], \quad (47)$$

где  $v = \frac{4}{3}\pi r_0^3$  – объём атома,  $E_0 = E_{ks}|_{k=0,s=0}$  – энергия основного состояния нейтрального атома.

Вычисления по формулам (46) – (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/ $g$  ( $A$  – атомная масса).

## 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 искажению 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 связанными, а энергия, необходимая для ионизации оставшихся связанных электронов, уменьшается (см. рис. 2).

Это явление называют снижением потенциала ионизации (Ionization Potential Depression – IPD) или понижением границы непрерывного спектра (Continuum

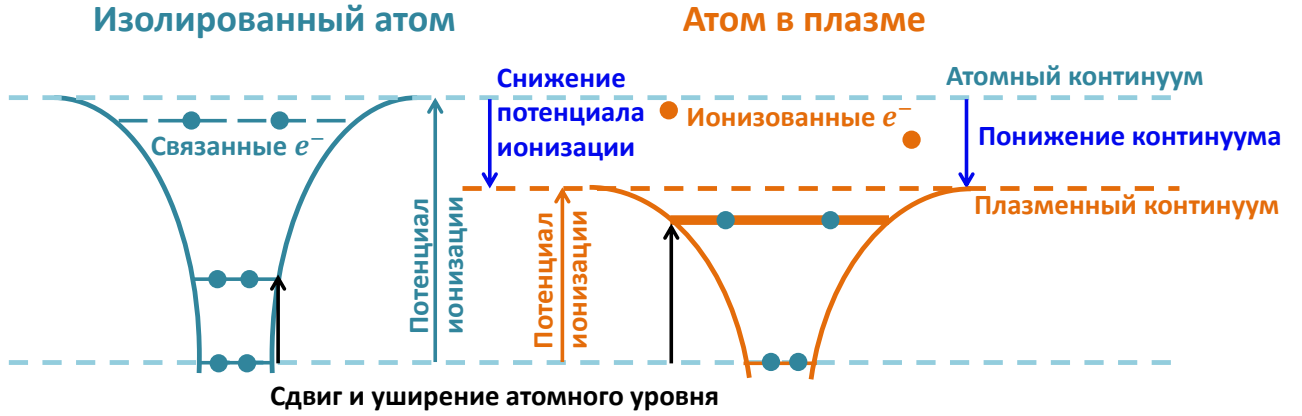


Рис. 2. Схематическое представление снижения потенциала ионизации

Lowering – CL). Так как это приводит к увеличению ионизации, то явление также 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) [48] и Экера-Кролла (ЭК) [49].

### 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  $\rho$ , 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  $\rho = n_e \frac{A}{Z_0 N_A}$ .

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

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

## 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. Наличие 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 (11),  $\varepsilon$  – энергия свободных электронов,  $f_h$  – относительная концентрация горячих электронов.

Если максимумы функций распределения разнесены на достаточное расстояние ( $T_h \gg T_e$ ), то скорости процессов могут быть также представлены в виде суммы

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

$$\alpha = n_e a_0^3 v_0 \langle \sigma F(\varepsilon) \rangle.$$

В отличие от прямых столкновительных процессов, т.е. электрон-ионных столкновительных процессов, ведущих к увеличению заряда иона ( $\alpha^{ce} \sim \alpha^{ce}(T_e, T_h)$ ,  $\alpha^{ci} \sim \alpha^{ci}(T_e, T_h)$ ), присутствие горячих электронов в плазме не оказывает существенного влияния на скорости обратных процессов ( $\alpha^{cd} \sim \alpha^{cd}(T_e)$ ,  $\alpha^{ir} \sim \alpha^{ir}(T_e)$ ). 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 [50]. При расчётах полагаем, 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 диэлектронной рекомбинации ( $\alpha^{phr} \sim \alpha^{phr}(T_e)$ ,  $\alpha^{dc} \sim \alpha^{dc}(T_e)$ ) не зависят от горячих электронов.

## Численные методы

### Решение системы кинетических уравнений

Общая размерность системы уравнений (9) 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 определенного 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 (10).

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

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

Матрица  $\tilde{A}$  имеет блочно-трехдиагональный вид и является разреженной (см. рис. 3). Размерность полученной матрицы при этом составит  $N^* - 1$ .

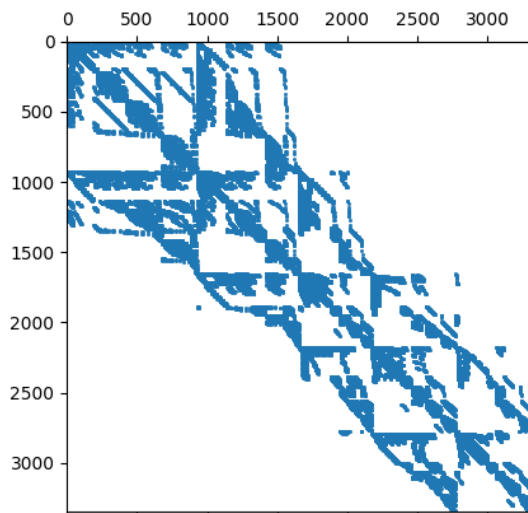


Рис. 3. Пример вида матрицы  $\tilde{A}$

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 [51], хотя он и не является оптимальным по скорости.

Полученное решение  $X$  системы уравнений (9) требуется перенормировать согласно условию нормировки (10).

### **Интегральная экспонента**

При расчёте скоростей процессов столкновительной и радиационной ионизации приходится вычислять интегралы от показательных функций, содержащих экспоненту (см. формулы (20,38)).

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

$$\begin{aligned} E_1(z) &= \int_z^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt = \\ &= -\gamma - \ln z - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-z)^n}{nn!}, \end{aligned} \quad (48)$$

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

При аппроксимации интегральной экспоненты (48) будем использовать формулы, предложенные Алленом [52] и Хастингом [53]:

$$E_1^a(z) = \begin{cases} -\ln z + a_0 + a_1z + a_2z^2 + a_3z^3 + a_4z^4 + a_5z^5, & \text{для } 0 \leq z < 1, \\ \frac{e^{-z} b_0 + b_1z + b_2z^2 + b_3z^3 + z^4}{z c_0 + c_1z + c_2z^2 + c_3z^3 + z^4}, & \text{для } z \geq 1, \end{cases}$$

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  $2 \times 10^{-7}$  и  $2 \times 10^{-8}$  соответственно.

Расчёт прямых и обратных скоростей радиационного процесса ионизации (37 – 38) требует вычисления следующих интегралов

$$\begin{aligned} F_1(x) &= \int_x^{\infty} \frac{W(t)}{t} dt, \\ F_2(x) &= e^x \int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} [1 + W(t)] dt, \end{aligned}$$

где спектральная плотность фотонов  $W(\omega)$  предполагается постоянной 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

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

### ***Скорость процесса возбуждения***

При расчёте скоростей прямых и обратных столкновительных процессов возбуждения (16,17) табличные значения функции  $p(y)$  для ионов (см. табл. 1) заменяются аппроксимацией (см. рис. 4)

$$p(y) \approx \frac{0,2}{\ln 2} \ln \left( 2 + \frac{1}{1,78 y} \right), \quad (49)$$

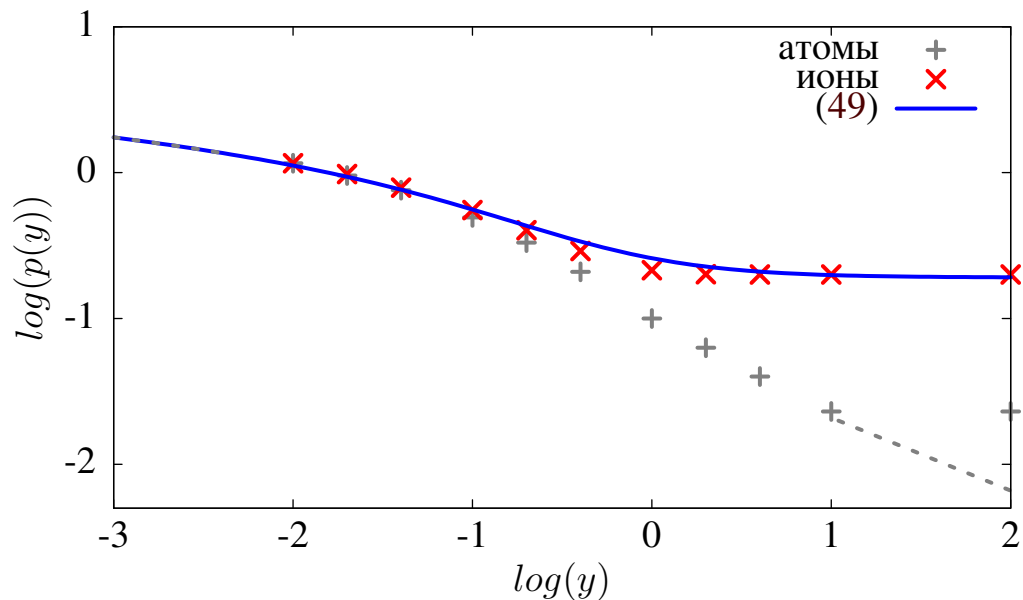
имеем

$$\begin{aligned} \alpha_{ks \rightarrow ks'}^{ex} &= \frac{8\pi\sqrt{\pi}}{\sqrt{6}} a_0^3 \nu_0 \frac{0,2}{\ln 2} \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} f_{ks, ks'} \frac{e^{-y}}{y} \ln \left( 2 + \frac{1}{1,78 y} \right) = \\ &= 3,07 \times 10^{-8} \frac{n_e}{\sqrt{\theta}} f_{ks, ks'} \frac{e^{-y}}{y} \ln \left( 2 + \frac{1}{1,78 y} \right). \end{aligned} \quad (50)$$

Таблица 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. 4. Значения множителя  $p(y)$  для атомов и ионов по данным из табл. 1 и их аппроксимация для ионов по формуле (49)

### **Сечение тормозного поглощения**

При расчёте сечения процесса тормозного поглощения (45) требуется вычислить определённый интеграл. При  $\zeta \geq 0$  используется квадратурная формула типа Гаусса [54]:

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

где  $x_i$  и  $a_i$  – узлы и веса полиномов Эрмита.

Тогда расчётные формулы можно переписать в виде:

$$\sigma^{\text{ff}}(x) = \begin{cases} C_{\text{brem}} e^{\zeta/\theta} \sum_{i=1}^N a_i G \left( A_{\text{brem}}, x_i, \sqrt{(x_i)^2 + x} \right), & -\zeta \leq 0; \\ C_{\text{brem}} h_b \sum_{i=1}^{n_b} b_i \frac{G \left( A_{\text{brem}}, y_i, \sqrt{(y_i)^2 + x} \right)}{1 + \exp \left( (y_i)^2 + \zeta \right)}, & -\zeta > 0, \end{cases} \quad (51)$$

где

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

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

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

при фиксированных параметрах  $n_b = 1000, u = 20$ . Функция  $G(a, b, c)$  в (51) вычисляется следующим образом:

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

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

### **Понижение границы непрерывного спектра**

Важно отметить, что энергия ионизации  $\varepsilon^i$  в формуле (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 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  $\Delta I_k^{IPD}$  по моделям СП или ЭК и понижения границы непрерывного спектра  $\Delta\varepsilon_k$  для иона кратности  $k$ :

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

В формуле (12), используемой при расчёте вклада связно-свободных переходов (43, 44) в коэффициент поглощения (39) и излучательную способность (40), учтём влияние плотностных эффектов посредством следующей подстановки:

$$\varepsilon = \omega - \Delta\varepsilon^D.$$

### **Профиль Фойгта**

При расчёте фойгтовского профиля (41) спектральной линии необходимо вычислить интеграл следующего вида [45]:

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

Для вычисления функции  $K(x, y)$  используется квадратурная формула типа Гаусса на основе полиномов Эрмита [55]:

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

где  $s_j, \lambda_j$  – нули полинома Эрмита и числа Кристоффеля [54], расчёт значений выполняется при  $a = 1$ .

## Обозначения и единицы

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

$\rho$  – плотность вещества, г/см<sup>3</sup>;

$n_e$  – плотность электронов, см<sup>-3</sup>;

$n_i$  – плотность атомов (ионов), см<sup>-3</sup>;

$\alpha$  – скорость, с<sup>-1</sup>;

$T$  – температура электронов, эВ;

$\theta$  – температура электронов, а.е.;

$\varepsilon$  – энергия, а.е.;

$\zeta$  – химический потенциал, а.е.;

$\omega$  – энергия фотонов, эВ или а.е.;

$\sigma$  – сечение, см<sup>2</sup>;

$\kappa_\omega$  – спектральный коэффициент поглощения, см<sup>-1</sup>;

$j_\omega$  – спектральный коэффициент излучения, ТВт/(см<sup>3</sup>×эВ×ср);

$I_\omega$  – спектральная интенсивность энергии излучения, ТВт/(см<sup>2</sup>×эВ×ср);

$U_\omega$  – спектральная плотность энергии излучения, Дж/(см<sup>3</sup>×эВ);

$W_\omega$  – спектральная плотность фотонов.

## 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<sup>-1</sup> – атомная единица частоты;

$N_A = 6,022 \times 10^{23}$  моль<sup>-1</sup> – постоянная Авагадро;

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

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

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

## Заключение

Сформулирована модель столкновительно-излучательного равновесия, связывающая населённости электронных состояний в атомах и ионах со скоростями столкновительных и радиационных процессов. Для получения атомных данных используется модель Хартри-Фока-Слэтера в приближении изолированного иона. Список конфигураций формируется в зависимости от постановки задачи: исходя из этого 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 [56, 34] и Лотца [38] для скоростей столкновительных процессов

возбуждения и ионизации, соответственно. Для расчёта скоростей радиационных процессов используются формулы из [57, 58], скорости фотоионизации рассчитываются в том числе на основе сечений, полученных по формуле Крамерса [59], проинтегрированных по произвольному полю излучения. Скорость процесса автоионизации рассчитывается в дипольном приближении [39]. Скорости обратных процессов вычисляются на основе принципа детального равновесия [36, 37]. Для расчёта профиля спектральной линии используется профиль Фойгта [41].

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 окружающей плазмы [50], при этом функция распределения свободных электронов по энергиям предполагается максвелловской. Так как модель строится на основе базы данных, полученной для изолированных ионов, то для устранения нефизичного поведения среднего заряда и спектра поглощения/излучения при высоких плотностях были применены модели Стюарта-Пьятта [48] и Экера-Кролла [49] с целью снижения потенциалов ионизации.

Решение системы кинетических уравнений осуществляется с помощью прямого метода Гаусса с выделением главного элемента по столбцу [51].

Описанная модель реализована на языке программирования FORTRAN в виде отдельной программы THERMOS\_CRE [31], которая даёт возможность проведения расчётов на современных ЭВМ с параллельной архитектурой.

Программа рекомендуется к использованию в случаях, когда требуются базы данных по радиационным и термодинамическим свойствам веществ, применяемых в решении практических задач радиационной газовой динамики и физики плазмы высоких плотностей энергии. Реализован параллельный запуск задач на ЭВМ для фиксированных точек по температуре и плотности с помощью отдельных MPI-процессов.

Также разработанную программу предлагается использовать для моделирования спектров излучения и прохождения, получаемых на современных лазерных и разрядных высокоэнергетических установках, а также определения оптимальных параметров работы источников рентгеновского излучения в требуемом спектральном диапазоне.

## Библиографический список

1. 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.
2. 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.
3. 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.
  4. 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.
  5. Питаевский Л.П. // *ЖЭТФ*. 1962. Т. 42. С. 1326.
  6. Гуревич А.В., Питаевский Л.П. // *ЖЭТФ*. 1964. Т. 46. С. 1281.
  7. Гуревич А.В. // *Геомагн. и аэроном.* 1964. Т. 4. С. 3.
  8. *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.
  9. Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. М.: ИЛ, 1949. С. 440.
  10. Cowan R.D. The theory of atomic structure and spectra / Ed. by R. Cowan. 1981.
  11. 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.
  12. 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.
  13. 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.
  14. 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.
  15. 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.
  16. 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.

17. 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.
18. Gu M.F. The flexible atomic code // *Canadian Journal of Physics*. 2008. Vol. 86, no 5. P. 675–689.
19. 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.
20. Hakel 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.
21. 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.
22. 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.
23. 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.
24. 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.
25. Hansen S.B. Configuration interaction in statistically complete hybrid-structure atomic models // *Canadian Journal of Physics*. 2011. Vol. 89, no. 5. P. 633–638.
26. 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.
27. 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.
28. 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.
29. Gilleron F., Piron R. The fast non-LTE code DEDALE // *High Energy Density Physics*. 2015. Vol. 17. P. 219–230.

30. 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.
31. 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”.
32. 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.
33. 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.
34. Regemorter H. Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres. // *The Astrophysical Journal*. 1962. Vol. 136. P. 906.
35. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
36. Oxenius J. Kinetic theory of particles and photons : theoretical foundations of non-LTE plasma spectroscopy. Springer-Verlag, 1986. P. 353. ISBN: 9783540158097.
37. Faussurier G., Blancard C. Degeneracy and relativistic microreversibility relations for collisional-radiative equilibrium models // *Physical Review E*. 2017. Vol. 95, no. 6. P. 063201.
38. 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.
39. Жданов В.П. Диэлектронная рекомбинация // Вопросы теории плазмы / Под ред. М.А. Леонтович, Б.Б. Кадомцев. Москва: Энергоиздат, 1982. С. 79–92.
40. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. С. 686.
41. Voigt W. Uber das Gesetz der Intensitätsverteilung innerhalb der Linien eines Gasspektrums. 1912. URL: <https://publikationen.badw.de/de/003395768>.

42. 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.
43. Rozsnyai B.F. Spectral lines in hot dense matter // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 1977. Vol. 17, no. 1. P. 77–88.
44. 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.
45. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. С. 319.
46. 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.
47. 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.
48. Stewart J.C., Pyatt K.D. Lowering of Ionization Potentials in Plasmas // *The Astrophysical Journal*. 1966. Vol. 144. P. 1203.
49. 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.
50. 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.
51. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989. ISBN: 5020139963.
52. Allen E.E. Analytical approximations // *Mathematics of Computation*. 1954. Vol. 8, no. 48. P. 240–240.
53. Hastings C. Approximations for digital computers. The Rand series. Princeton edition. Princeton University Press, 1955. ISBN: 0000-0001-5-9.
54. Saizer H.E., Zucker R., Capuano R. Table of the Zeros and Weight Factors of the First Twenty Hermite Polynomials // *Journal of Research of the National Bureau of Standards*. 1952. Vol. 48, no. 2.
55. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Специальные функции математической физики. М.: Наука, 1984. С. 343.

56. 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.
57. Михалас Д. *Звездные атмосферы*. М.: Мир, 1982. Т. Часть II. С. 423.
58. 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.
59. 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.

## Оглавление

Введение . . . . .	3
Формулировка модели . . . . .	4
Выражения для скоростей элементарных процессов . . . . .	6
Коэффициент поглощения и излучательная способность. . . . .	13
Уравнение состояния . . . . .	16
Влияние плотностных эффектов . . . . .	16
Влияние горячих электронов. . . . .	18
Численные методы . . . . .	19
Заключение . . . . .	25
Библиографический список . . . . .	26