

МОДЕЛЬ СРЕДНЕГО ИОНА ДЛЯ РАСЧЕТА СОСТОЯНИЯ МНОГОЗАРЯДНОЙ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ НЕСТАЦИОНАРНОЙ И НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЫ

С. А. Бельков, П. Д. Гаспарян, Ю. К. Кочубей, Е. И. Митрофанов

Поступила в редакцию 28 июня 1996 г.

Проведено исследование кинетики ионизации многозарядной нестационарной неравновесной плазмы в приближении среднего иона. В качестве моделей атома рассмотрены приближения водородоподобного иона, энергетические уровни которого зависят как только от главного квантового числа, так и от главного и орбитального квантовых чисел. Представлены результаты расчетов различных характеристик плазмы, выполненных в рамках этой модели, проведено сравнение с ранее опубликованными данными, а также с расчетами в приближении химической связи. Показано, что модель среднего иона удовлетворительно описывает спектральные характеристики неидеальной плазмы.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования радиационных и термодинамических свойств высокотемпературной многозарядной плазмы основаны на разделении плазмы на слабо взаимодействующие подсистемы, кинетику которых можно описать уравнениями переноса для одночастичных функций распределения. В области высокотемпературной плазмы такими подсистемами являются подсистемы ионов, электронов и фотонов. В ряде случаев плазма может находиться в состоянии частичного термодинамического равновесия компонент. По мере увеличения плотности плазмы увеличивается степень ее неидеальности и одновременно уменьшается время установления равновесия между ее компонентами. Поскольку время установления равновесия в фотонной подсистеме является максимальным, большой класс задач достаточно точно описывается приближением, в котором учитывается неравновесность только фотонной подсистемы (приближение локального термодинамического равновесия). Особенностью неравновесной высокотемпературной многозарядной плазмы является возрастающая с ростом Z роль радиационных процессов в кинетике плазмы по сравнению со столкновительными процессами. Это приводит к тому, что при малых размерах плазмы и больших значениях Z неравновесность фотонной подсистемы вызывает неравновесность электронной подсистемы для весьма высоких (вплоть до твердотельных) плотностей высокотемпературной многозарядной плазмы, при которых плазма сильно неидеальна. Неидеальная высокотемпературная многозарядная плазма образуется в экспериментах по исследованию мишеней для лазерного термоядерного синтеза, инерциального термоядерного синтеза, в экспериментах по исследованию взаимодействия ультракоротких мощных импульсов лазерного излучения с твердыми телами и т. д. Описание состояния такой плазмы с учетом газодинамического движения и переноса энергии возможно лишь в рамках кинетического подхода.

2. УРАВНЕНИЯ КИНЕТИКИ ИОНИЗАЦИИ В ПРИБЛИЖЕНИИ СРЕДНЕГО ИОНА

Детальное описание многозарядной, многокомпонентной плазмы требует определения в каждый момент времени распределения концентраций большого числа состояний ионов, характеризующихся не только их зарядом, но и конфигурацией чисел заполнения электронных оболочек иона в заданном зарядовом состоянии. При этом необходимо решение большой системы кинетических уравнений, описывающих переходы между всеми возможными состояниями ионов. Такое описание плазмы носит название модели химической связи [1]. Однако возможности учета кинетики ионизации в приближении модели химической связи в программах радиационной газодинамики, особенно двумерных и трехмерных, весьма ограничены, так как в каждый момент времени в каждой пространственной точке необходимо решить большое число кинетических уравнений. При этом количество уравнений быстро возрастает с переходом к описанию плазмы с большим числом Z ($Z > 10$) и может составлять сотни и даже тысячи.

Предполагая, что заряд иона изменяется непрерывно, мы можем заменить совокупность ионов в различных зарядовых состояниях одним ионом в некотором среднем зарядовом состоянии. Состояние такого среднего иона полностью описывается заданием чисел заполнения различных электронных оболочек иона, которые также могут изменяться непрерывно. В этом случае полная система уравнений кинетики ионизации плазмы в приближении среднего иона может быть редуцирована к уравнениям кинетики средних населенностей электронных состояний [2, 3]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(P_{\xi}N) = & R_{\xi}N_eNQ_{\xi} - I_{\xi}N_eNP_{\xi} + N \left[\sum_{\substack{\xi' \\ (E_{\xi'} > E_{\xi})}} A_{\xi'\xi}P_{\xi'}Q_{\xi} - \sum_{\substack{\xi' \\ (E_{\xi'} < E_{\xi})}} A_{\xi\xi'}P_{\xi}Q_{\xi'} \right] + \\ & + NN_e \left[\sum_{\substack{\xi' \\ (E_{\xi'} > E_{\xi})}} C_{\xi'\xi}^D P_{\xi'}Q_{\xi} - \sum_{\substack{\xi' \\ (E_{\xi'} < E_{\xi})}} C_{\xi\xi'}^D P_{\xi}Q_{\xi'} \right] + \\ & + NN_e \left[\sum_{\substack{\xi' \\ (E_{\xi'} < E_{\xi})}} C_{\xi'\xi}^U P_{\xi'}Q_{\xi} - \sum_{\substack{\xi' \\ (E_{\xi'} > E_{\xi})}} C_{\xi\xi'}^U P_{\xi}Q_{\xi'} \right], \end{aligned} \quad (1)$$

где P_{ξ} — средняя населенность электронной оболочки иона, характеризующейся квантовыми числами ξ . В модели среднего иона без учета расщепления по орбитальному моменту ξ определяется главным квантовым числом n , а в модели иона с учетом расщепления по орбитальному моменту — парой квантовых чисел (n, l) . Кроме того, в (1) $Q_{\xi} = 1 - P_{\xi}/g_{\xi}$ — число вакансий в состоянии ξ , g_{ξ} — статистический вес состояния ξ , $N = \rho N_A/A$ — концентрация ионов, ρ — плотность вещества, A — атомный вес иона, N_A — число Авогадро,

$$N_e = N\langle Z \rangle = N \left[Z_0 - \sum_{\xi} P_{\xi} \right]$$

— концентрация свободных электронов, $\langle Z \rangle$ — заряд среднего иона, Z_0 — заряд ядра, I_ξ, R_ξ — соответственно коэффициенты скоростей ионизации и рекомбинации в состоянии ξ , $A_{\xi'\xi}, C_{\xi'\xi}^D, C_{\xi'\xi}^U$ — скорости переходов между состояниями (ξ', ξ) в результате процессов спонтанного радиационного распада, ударного тушения и возбуждения.

Константы скоростей атомных процессов, входящих в правую часть системы уравнений (1), в общем случае являются функциями температуры и плотности плазмы, а также энергий связи электронов в состоянии ξ . Значения энергий связи, в свою очередь, зависят от населенностей уровней и плотности ионов (так называемый эффект ионизации давлением). Таким образом, чтобы замкнуть систему уравнений (1), необходимо использовать некоторую модель атома, позволяющую рассчитать энергии связи электрона в состоянии ξ по известным значениям населенностей всех состояний. Наиболее простыми моделями атома являются различные модификации модели Слэтера [4]. Однако все эти модели обладают одним существенным недостатком: они хорошо описывают состояния изолированного, свободного иона и неприменимы для случая достаточно плотной плазмы, когда влиянием соседних ионов уже нельзя пренебречь и их наличие может существенно изменить как энергии связанных состояний данного иона, так и статистический вес состояния. Использование моделей самосогласованного поля типа Хартри–Фока [5] позволяет учесть влияние окружения, но их применение на практике сопряжено с громоздкими дополнительными вычислительными затратами, что неприемлемо при проведении необходимых кинетических расчетов совместно с газодинамическими расчетами течения плазмы. В [2] было предложено ввести зависимость статистического веса состояния от плотности вещества таким образом, чтобы при малых плотностях получался статистический вес состояния изолированного иона, а при больших плотностях он стремился к нулю. Это моделирует эффект снятия вырождения состояния ξ при взаимодействии с окружающими ионами (например, из-за штарковского расщепления уровня), в результате чего часть связанных состояний переходит в область непрерывного спектра. Наиболее простой функцией, обладающей данными свойствами, является функция вида

$$g_\xi = \frac{g_\xi^0}{1 + a(R_\xi^0/R_0)^b}, \quad (2)$$

где $R_0 = (3A/4\pi\rho N_A)^{1/3}$ — среднее расстояние между ионами в плазме, R_ξ^0, g_ξ^0 — эффективный радиус орбиты и статистический вес уровня ξ изолированного иона.

При выборе функции вида (2) и при надлежащем определении эффективного радиуса оболочки первыми при увеличении плотности плазмы будут исчезать высоко-возбужденные состояния. Зависимость степени ионизации $\langle Z \rangle$ холодного вещества от плотности ρ при этом имеет вид

$$\langle Z \rangle = \sum_{\xi} P_{\xi}^0 \left(1 - \frac{g_{\xi}}{g_{\xi}^0} \right), \quad (3)$$

где P_{ξ}^0 — населенности уровней нейтрального изолированного ($\rho = 0$) атома.

Параметры a и b могут быть найдены из условия наилучшей аппроксимации формулой (3) зависимости степени ионизации холодного вещества от плотности, полученной, например, в рамках модели Томаса–Ферми [6]. Конкретные значения констант a и b зависят от модели атома и будут приведены ниже.

В уравнение кинетики ионизации вида (1) не входят слагаемые, описывающие процессы фотоионизации и фотовозбуждения, которые являются обратными процессами по отношению к фоторекомбинации и радиационному распаду. Такая модель, в которой учитываются только ударные процессы (ударная ионизация и рекомбинация, ударное возбуждение и тушение) и процессы излучения (фоторекомбинация, радиационный распад), носит название столкновительно-излучательной. Она описывает оптически тонкую плазму, в которой плотность излучения мала, и поэтому фотоионизацией и фотовозбуждением можно пренебречь. Стационарное решение, полученное в рамках столкновительно-излучательной модели, в общем случае не является термодинамически равновесным, поскольку не все прямые процессы скомпенсированы обратными. Однако в случае больших плотностей, когда ударные процессы преобладают над остальными, стационарное решение столкновительно-излучательной модели должно переходить в термодинамически равновесное. При малых плотностях можно пренебречь процессами трехчастичной рекомбинации и столкновительно-излучательное приближение переходит в так называемое корональное приближение.

3. МОДЕЛЬ ИОНА БЕЗ УЧЕТА РАСЩЕПЛЕНИЯ ПО ОРБИТАЛЬНЫМ КВАНТОВЫМ ЧИСЛАМ (Н-МОДЕЛЬ)

Наиболее простой моделью иона, позволяющей определить энергетические уровни связанных состояний, является модель, предложенная в [7]. В данной модели состояние иона определяется числами заполнения оболочек с различными главными квантовыми числами n . Состояния с одинаковыми главными квантовыми числами, но различными орбитальными моментами предполагаются вырожденными (водородоподобная (Н) модель атома).

Пусть в состоянии с главным квантовым числом n находится P_n электронов. Тогда эффективный заряд ядра, определяющий кулоновское взаимодействие находящегося на оболочке с данным квантовым числом n электрона, с учетом его экранировки электронами внутренних (по отношению к данной) оболочек будет вычисляться по формуле

$$Z_n = Z_0 - \sum_{m \leq n} P_m \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm} \right), \quad (4)$$

где σ_{nm} — матрица экранировочных констант, впервые предложенная в [7], ее коэффициенты приведены в табл. 1.

Полная энергия иона рассчитывается по следующей формуле [7]:

$$E = - \sum_m \frac{P_m Z_m^2}{m^2} I_H, \quad (5)$$

где $I_H = e^2/2a_0$ — потенциал ионизации атома водорода, a_0 — радиус Бора.

Энергия связи для уровня находится дифференцированием (5) по населенности P_n :

$$E_n^0 = \frac{\partial E}{\partial P_n} = I_H \left[-\frac{Z_n^2}{n^2} + \sum_{m \geq n} 2P_m \frac{Z_m}{m^2} \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm} \right) \right]. \quad (6)$$

Таблица 1

Коэффициенты экранировочной матрицы σ_{nm}

m	n									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0.3125	0.9380	0.9840	0.9954	0.9980	0.9990	0.9995	0.9999	0.9999	0.9999
2	0.2345	0.6038	0.9040	0.9722	0.9880	0.9979	0.9985	0.9990	0.9999	0.9999
3	0.1093	0.4018	0.6800	0.9155	0.9796	0.9820	0.9860	0.9900	0.9920	0.9999
4	0.0622	0.2430	0.5150	0.7100	0.9200	0.9600	0.9750	0.9830	0.9860	0.9900
5	0.0399	0.1381	0.3527	0.5888	0.7320	0.8300	0.9000	0.9500	0.9700	0.9800
6	0.0277	0.1109	0.2455	0.4267	0.5764	0.7248	0.8300	0.9000	0.9500	0.9700
7	0.0204	0.0808	0.1811	0.3184	0.4592	0.6098	0.7374	0.8300	0.9000	0.9500
8	0.0156	0.0624	0.1392	0.2457	0.3711	0.5062	0.6355	0.7441	0.8300	0.9000
9	0.0123	0.0493	0.1102	0.1948	0.2994	0.4222	0.5444	0.6558	0.7553	0.8300
10	0.0100	0.0400	0.0900	0.1584	0.2450	0.3492	0.4655	0.5760	0.6723	0.7612

Радиус орбиты оболочки вычисляется по известному выражению для радиуса орбиты в атоме водорода:

$$R_n^0 = a_0 n^2 / Z_n. \quad (7)$$

Константы в выражении (2), соответственно, равны $a = 3.5$, $b = 1.75$.

В общем случае плотной плазмы кроме снятия вырождения происходит снижение потенциала ионизации оболочки из-за влияния кулоновских полей окружающих ионов, так что выражение (6) может быть записано в виде $E_n = E_n^0 + \Delta E$, где $\Delta E = e^2 \langle Z \rangle / 2R_0$ — сдвиг уровня из-за ионизации давлением [2].

4. МОДЕЛЬ ИОНА С УЧЕТОМ РАСЩЕПЛЕНИЯ ПО ОРБИТАЛЬНЫМ КВАНТОВЫМ ЧИСЛАМ (*L*-МОДЕЛЬ)

Развитием простой модели водородоподобного иона является модель, учитывающая *l*-расщепление уровней (назовем ее *L*-моделью). Согласно этой модели, эффективный заряд ядра Z_n на *n*-ой оболочке атома с учетом экранировки внутренними электронами записывается в виде [8]

$$Z_n = Z_0 - \sum_{m \leq n} P_m \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm} \right) + \sum_m P_m q_{mn} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{P_{nl}}{P_n} G_{nl},$$

$$P_m = \sum_{l'=0}^{m-1} P_{ml'}.$$

Значения v_n и q_{nn} приведены в табл. 2, а q_{nm} и G_{nl} вычисляются по формулам

$$q_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \left(\frac{m}{n} \right)^5 \left[2 - \left(\frac{m}{n} \right)^2 \right]^{1/2}, & 2n^2 > m^2, \\ 0, & 2n^2 \leq m^2, \end{cases}$$

$$G_{nl} = \frac{1}{4n^2} [n^2 - 2l(l+1) - 1] + v_n.$$

Таблица 2
Численное значение констант q_{nn} и v_n ,
используемых в L -модели

n	q_{nn}	v_n
1	0.270672	0.000
2	0.366310	0.070
3	0.371802	0.020
4	0.329523	0.012
5	0.295072	-0.100
6	0.296580	-0.400
7	0.320910	-0.420
8	$1/\pi$	0
9	$1/\pi$	0
10	$1/\pi$	0

Полная энергия иона вычисляется так же, как и для H -модели, по формуле (5). Тогда энергетические уровни E_{nl} рассчитываются по формуле

$$E_{nl} = E_n^0 - 2I_H \left[\sum_m P_m (q_{nm} S_m - q_{mn} S_n) + \frac{Z_n}{n^2} G_{nl} \sum_m P_m q_{mn} \right] + \Delta E,$$

где

$$S_n = \frac{Z_n}{n^2} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{P_{nl}}{P_n} G_{nl},$$

E_n^0 — энергия уровня без учета l -расщепления (6).

Данная модель использовалась в [9] для расчета характеристик плазмы в приближении локального термодинамического равновесия. Однако предложенное в [9] выражение для радиуса орбиты оболочки nl при расчете статистического веса в (2) противоречиво, так как приводит к тому, что с увеличением плотности плазмы первыми начинают исчезать оболочки с малыми l , являющиеся более симметричными и имеющие большую энергию связи. Более обоснованным является использование в качестве эффективного радиуса оболочки не среднее расстояние электрона от ядра $R_{nl} \sim \langle r \rangle$ [9], а средний радиус дипольного взаимодействия $R_{nl} \sim \langle 1/r^2 \rangle^{-1/2}$. Таким образом, оболочки с большими l имеют эффективно больший радиус, а именно:

$$R_{nl} = \frac{a_0 n^{3/2}}{Z_n} \sqrt{l + \frac{1}{2}}. \quad (8)$$

Использование (8) вместо (7) в (2) приводит к изменению значений констант: $a = 12.0$, $b = 2.7$. На рис. 1 представлены зависимости средней степени ионизации для алюминия, меди, олова, золота от плотности холодной ($T = 0$) плазмы для приведенных выше констант в сравнении с моделью Томаса-Ферми.

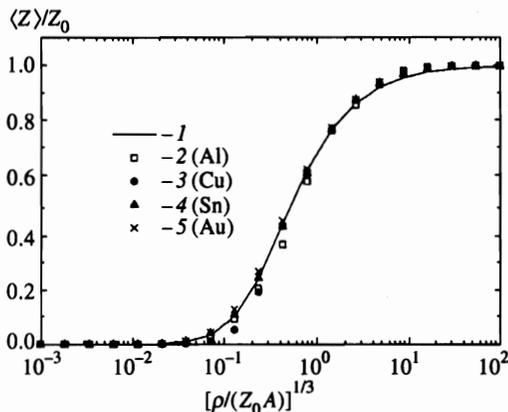


Рис. 1. Зависимость степени ионизации холодного вещества от плотности: 1 — модель Томаса-Ферми, 2-5 — расчет по формуле (3) с $a = 12.0$, $b = 2.7$ для Al, Cu, Sn, Au

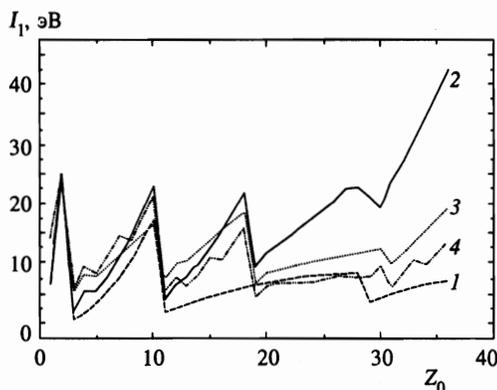


Рис. 2. Потенциалы ионизации нейтральных атомов I_1 , вычисленные по Н-модели (кривая 1), L-модели (кривая 2), модели [10] (кривая 3); 4 — экспериментальная кривая

Несколько иная модель атома с учетом l -расщепления была рассмотрена в работе [10]. Авторами [10] было предложено использовать для расчета экранированного заряда ядра выражение аналогичное (4) с заменой экранировочной матрицы σ_{mn} матрицей, зависящей не только от главного квантового числа, но и от орбитального. К сожалению, полная проверка этой модели в широком диапазоне зарядов ядра не представляется возможной, так как новая экранировочная матрица определена только для значений n , не превышающих 4.

На рис. 2 представлены первые потенциалы ионизации элементов с зарядами ядер $Z_0 = 1, \dots, 36$, вычисленные по Н- и L-моделям, а также с использованием матрицы [10]. Здесь же приведена экспериментальная кривая [11]. Как видно из рисунка, L-модель значительно завышает первые потенциалы ионизации для элементов с $Z_0 \geq 20$. Однако существуют классы задач (например, проблема взаимодействия лазерного излучения с веществом), когда диапазон температур и плотностей таков, что плазма достаточно сильно ионизована. В этом случае определяющую роль при вычислении, например, спектральных характеристик плазмы, имеет не первый потенциал ионизации, а последующие. На рис. 3 приведены зависимости потенциала ионизации меди от степени ионизации, вычисленные по описанным здесь моделям, а также экспериментальные значения из [11]. В целом обе модели неплохо согласуются с лите-

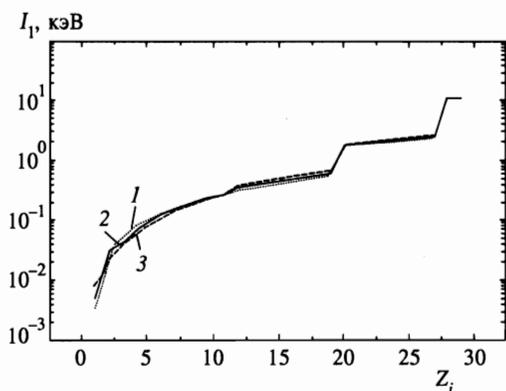


Рис. 3. График зависимости потенциалов ионизации I_Z меди от степени ионизации Z_i : кривые 1, 2 — результаты расчетов по H- и L-моделям, кривая 3 построена по данным из [11]

ратурными данными. Учет l -расщепления дает дополнительные скачки в потенциалах ионизации, возникающие при переходе от одной ионизуемой подоболочки к другой.

5. КОНСТАНТЫ СКОРОСТЕЙ АТОМНЫХ ПРОЦЕССОВ

В настоящее время существует множество выражений для константы скорости ударной ионизации. Наиболее распространенными являются аппроксимации, предложенные в работах [12–16]. Все они могут быть записаны в виде

$$I_{\xi} = CT^{-3/2} \frac{\exp(-u)}{u^{\zeta}} F(u, Z_n), \quad (9)$$

где $u = -E_{\xi}/T$, T — температура электронов. Константы ζ и C , а также функция $F(u, Z_n)$ приведены в табл. 3.

Таблица 3

Параметры C , ζ и функция $F(u, Z_n)$, входящие в аппроксимационную формулу (9) для константы скорости ударной ионизации

№	Источник	C , $\text{см}^3 \text{с}^{-1} \text{кэВ}^{1.5}$	ζ	$F(u, Z_n)$
1	[12]	$3.44 \cdot 10^{-11}$	2	$12.18 [1 - \exp(-u)] (1 + 0.0335n) \times$ $\times (1 - 0.622/Z_n - 0.0745/Z_n^2) f(y) ,$ $y = 0.25 \ln u,$ $f(y) = 0.23 + 0.46y + 0.1074y^2 -$ $-0.045y^3 - 0.01505y^4$
2	[13]	$9.516 \cdot 10^{-11}$	1	$E_1(u) \exp u$
3	[14]	$6.82 \cdot 10^{-11}$	2	1
4	[15]	$7.399 \cdot 10^{-12}$	7/4	1
5	[16]	$3.92 \cdot 10^{-11}$	2	$0.915(1 + 0.64/u)^{-2} + 0.42(1 + 0.5/u)^{-2}$

Примечание: $E_1(u) = \int_u^{\infty} e^{-t} \frac{dt}{t}$ — интегральная экспонента.

В константе скорости рекомбинации учитывались два процесса — трехчастичная рекомбинация и фоторекомбинация:

$$R_{\xi} = R_{\xi}^{3b} + R_{\xi}^R.$$

Скорость трехчастичной рекомбинации в состоянии ξ R_{ξ}^{3b} вычисляется из принципа детального равновесия:

$$R_{\xi}^{3b} = \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e T} \right)^{3/2} N_e \exp(u) g_{\xi} I_{\xi}.$$

Скорость фоторекомбинации электронов в состоянии ξ R_{ξ}^R определяется согласно выражению

$$R_{\xi}^R = \frac{8\sqrt{2\pi} e^{10} g_{\xi} Z_n^4}{3\sqrt{3} m_e \hbar^3 c^3 n^5 T^{3/2}} \exp(u) E_1(u),$$

где

$$E_1(u) = \int_u^{\infty} e^{-t} \frac{dt}{t}$$

— интегральная экспонента.

Скорость спонтанного радиационного распада из состояния ξ' в состояние ξ вычислялась по формуле [17]

$$A_{\xi',\xi} = \frac{2e^2}{m_e c^3 \hbar^2} (E_{\xi',\xi})^2 \left(\frac{g_{\xi}}{g_{\xi'}} \right) f_{\xi,\xi'}, \quad l' = l \pm 1,$$

где $E_{\xi',\xi} = E_{\xi'} - E_{\xi}$ — энергия перехода, $f_{\xi,\xi'}$ — сила осциллятора для рассматриваемого перехода.

В Н-модели для вычисления сил осцилляторов мы использовали выражение, полученное для переходов между уровнями с главными квантовыми числами m и n водородоподобного иона [2]:

$$f_{nm} = 1.96 \frac{Z_n^4 Z_m^2}{n^5 m^3 E_{\xi',\xi}^3}.$$

Для L-модели силы осцилляторов перехода с уровня nl на уровень $m'l'$ вычислялись по формуле [18]

$$f_{nl,m'l'} = \frac{1}{3} \frac{\max(l, l')}{2l+1} \frac{E_{\xi',\xi}}{I_H} \left(\frac{\mathcal{R}_{nl}^{m'l'}}{a_0} \right)^2,$$

$$\mathcal{R}_{nl}^{m'l'} = \int_0^{\infty} R_{nl}(r) R_{m'l'}(r) r^3 dr,$$

где $R_{nl}(r)$ — радиальная часть волновой функции электрона, находящегося в кулоновском поле ядра с зарядом Z_n . Аналитическое выражение для интеграла $\mathcal{R}_{nl}^{m'l'}$ можно найти в [6].

Формулы для констант скоростей ударного возбуждения с уровня nl на уровень $m'l'$ имеет вид [17]

$$C_{\xi, \xi'}^U = 24\pi \frac{\hbar^4}{m_e^2 e^4} \left(\frac{I_H}{E_{\xi', \xi}} \right)^2 f_{\xi, \xi'} \sqrt{\frac{2T}{\pi m_e}} \beta_{\xi', \xi} \exp(-\beta_{\xi', \xi}) \Gamma_{\xi, \xi'},$$

где $\beta_{\xi', \xi} = E_{\xi', \xi} / T$,

$$\Gamma_{\xi, \xi'} = 0.19 \left\{ 1 + 0.9 \exp(\beta_{\xi', \xi}) E_1(\beta_{\xi', \xi}) \left[1 + \frac{m(m-n)}{20} \left(1 + \beta_{\xi', \xi} \left\{ 1 - \frac{2}{Z} \right\} \right) \right] \right\}$$

—фактор Гаунта [2].

Скорость перехода возбужденного состояния ξ' в состояние ξ в процессе ударного тушения находится из принципа детального равновесия:

$$C_{\xi', \xi}^D = C_{\xi, \xi'}^U \frac{g_{\xi}}{g_{\xi'}} \exp(\beta_{\xi', \xi}).$$

6. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Описанная выше модель кинетики ионизации численно исследовалась для широкого диапазона температур и плотностей плазмы и использовалась для расчета ее спектральных характеристик. Система дифференциальных уравнений (1) решалась неявным методом Эйлера, а на каждом временном шаге полученная система алгебраических уравнений решалась методом Ньютона [19].

Нами проведены сравнительные расчеты с помощью H - и L -моделей среднего иона для различных составов, температур и плотностей плазмы. Скорость ударной ионизации рассчитывалась с использованием констант № 2 из табл. 3. На рис. 4 представлены зависимости среднего заряда плазмы алюминия при температуре $T = 100$ эВ от плотности для стационарного решения уравнений (1). Расчеты проводились как в приближении локального термодинамического равновесия (кривые 2), когда в уравнениях (1) учитывались только ударные процессы, так и в столкновительно-излучательном приближении (кривые 1). Как видно из данного рисунка, различия в зависимостях

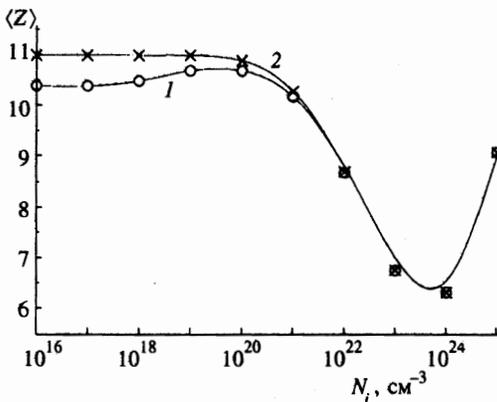


Рис. 4. Зависимость степени ионизации плазмы Al при температуре $T = 100$ эВ от плотности для модели среднего иона без l -расщепления (сплошные кривые) и с учетом l -расщепления (точки): 1 — столкновительно-излучательное приближение, 2 — приближение локального термодинамического равновесия

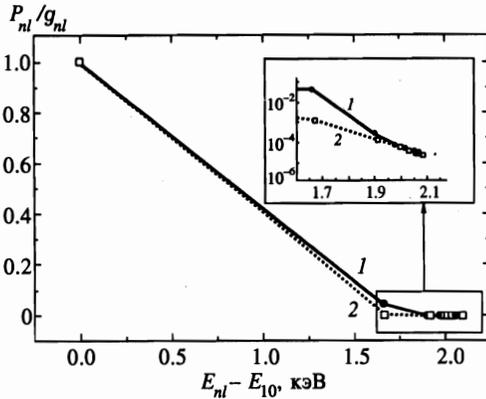


Рис. 5. Зависимость чисел заполнения уровней от энергии связи уровня в модели среднего иона с учетом l -расщепления для Al-плазмы с электронной температурой $T = 100$ эВ и плотностью $N_i = 10^{19}$ см $^{-3}$: 1 — столкновительно-излучательное приближение, 2 — приближение локального термодинамического равновесия

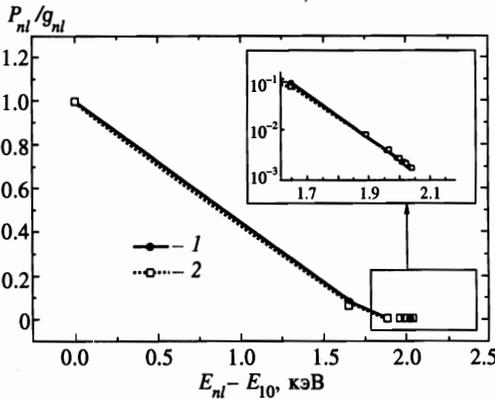


Рис. 6. Зависимость чисел заполнения уровней от энергии связи уровня в модели среднего иона с учетом l -расщепления для Al-плазмы с электронной температурой $T = 100$ эВ и плотностью $N_i = 10^{21}$ см $^{-3}$: 1 — столкновительно-излучательное приближение, 2 — приближение локального термодинамического равновесия

среднего заряда для обеих моделей среднего иона очень малы и не превышают долей процента. Расчеты в приближении локального термодинамического равновесия при малых плотностях дают более высокие значения среднего заряда, чем расчеты в столкновительно-излучательном приближении. С ростом плотности столкновительно-излучательное приближение, как и предполагалось, переходит в приближение локального термодинамического равновесия. При концентрации ионов $N_i > 10^{21}$ см $^{-3}$ оба приближения дают практически одинаковые решения не только для среднего заряда, но и для населенностей.

На рис. 5, 6 показаны зависимости чисел заполнения P_{nl}/g_{nl} уровня nl от энергии уровня для двух значений плотности. При малых плотностях столкновительно-излучательное приближение дает распределение чисел заполнения, существенно отличающееся от больцмановского. Более заселены состояния близкие к основному, тогда как высоковозбужденные состояния обеднены. Для плотности, соответствующей слиянию двух кривых на рис. 4, населенности также совпали.

На рис. 7, 8 показаны зависимости среднего заряда Al- и Ag-плазмы от температуры, вычисленные в приближении среднего иона и по модели химической связи при различных плотностях. В расчетах по модели химической связи учитывалось около 150 различных ионных состояний. Эффект ионизации давлением не учитывался, что, воз-

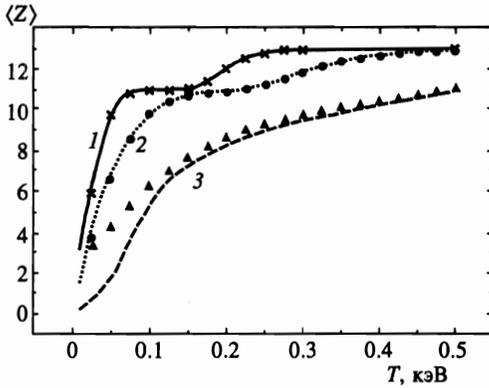


Рис. 7. Зависимости среднего заряда Al-плазмы от температуры T ; расчеты по модели химической связи (линии) и в приближении среднего иона (точки) для плотностей 10^{-3} (1), 10^{-1} (2), 10 г/см^3 (3)

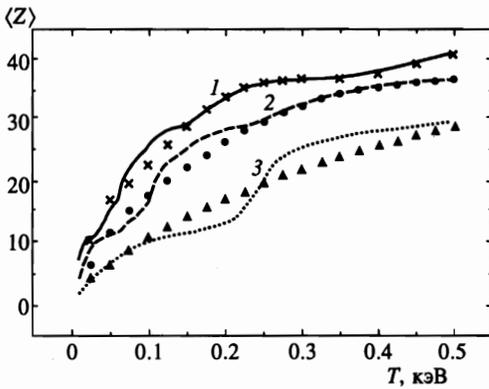


Рис. 8. Зависимости среднего заряда Ag-плазмы от температуры T ; расчеты по модели химической связи (линии) и в приближении среднего иона для плотностей 10^{-3} (1), 10^{-1} (2), 10 г/см^3 (3)

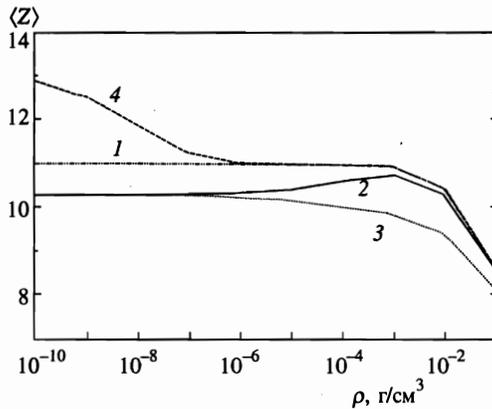


Рис. 9. Зависимости среднего заряда Al-плазмы при температуре $T = 100 \text{ эВ}$ от плотности для стационарного решения уравнений (1), когда в правой части этих уравнений учитывались следующие процессы: 1 — ударная ионизация и трехчастичная рекомбинация, фоторекомбинация, ударное возбуждение и ударное тушение; 2 — ударная ионизация и трехчастичная рекомбинация, фоторекомбинация, ударное возбуждение и ударное тушение, радиационный распад; 3 — ударная ионизация и трехчастичная рекомбинация, фоторекомбинация, радиационный распад. Кривая 4 получена в приближении локального термодинамического равновесия

можно, и является причиной расхождения результатов при плотности 10 г/см^3 . В целом же наблюдается удовлетворительное согласие температурных зависимостей, полученных по различным моделям кинетики.

Вопрос о влиянии различных процессов, учитываемых в кинетике ионизации, на средний заряд был изучен на примере плазмы алюминия при температуре 0.1 кэВ . На рис. 9 представлены зависимости среднего заряда от плотности для стационарного решения уравнений (1), когда при расчете правой части отключались различные процессы.

Из сравнения зависимостей 2 и 3 видно, что при плотности 10^{-6} – 10^{-5} г/см^3 влияние процессов ударного возбуждения и ударного тушения становится значительным, что благодаря каскадным процессам ионизации приводит к росту среднего заряда (кривая 2) с повышением плотности в диапазоне 10^{-6} – 10^{-3} г/см^3 . При плотностях больше 10^{-3} г/см^3 трехчастичная рекомбинация становится преобладающим процессом и средний заряд начинает уменьшаться. Зависимости 1, 2 и 4 показывают, что радиационный распад препятствует установлению равновесия (кривая 1 практически совпадает с кривой 4 уже при плотности 10^{-6} г/см^3 , а кривая 2 — только при плотности 10^{-1} г/см^3).

7. РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ИЗЛУЧЕНИЯ И ПОГЛОЩЕНИЯ

Выражения для спектральных коэффициентов тормозного и фотопоглощения квантов с энергией $\varepsilon_\nu = 2\pi\hbar\nu$ имеют вид [17]

$$k_\nu^{ff} = \frac{16\pi^2}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{3m_e T}} \frac{e^6 \hbar^2 N_A^2 \rho^2 (Z)^3}{cm_e A^2 \varepsilon_\nu^3},$$

$$k_\nu^{bf} = \frac{32\pi}{3\sqrt{3}} \frac{e^2 \hbar N_A \rho}{m_e c A \varepsilon_\nu^3} \sum_\xi P_\xi \frac{I_H^2 Z_n^4}{n^5} \theta(\varepsilon_\nu - |E_\xi|),$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Коэффициент поглощения в линиях [2]:

$$k_\nu^{abs bb} = \frac{2\pi^2 \hbar e^2 N_A \rho}{m_e c A} \sum_{\xi'} \sum_\xi P_\xi \left(1 - \frac{g_\xi P_{\xi'}}{g_{\xi'} P_\xi}\right) f_{\xi, \xi'} \psi_{\xi, \xi'} \delta_{l, l' \pm 1},$$

где $\psi_{\xi, \xi'}$ — контур линии.

Полный спектральный коэффициент поглощения с учетом вынужденного излучения равен

$$k_\nu^{abs} = (k_\nu^{ff} + k_\nu^{bf}) \left[1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_\nu}{T}\right)\right] + k_\nu^{abs bb}.$$

Для коэффициентов излучения в линиях и рекомбинационного излучения использовались выражения

$$k_\nu^{emi bb} = \frac{2\pi^2 \hbar e^2 N_A \rho [\exp(\varepsilon_\nu/T) - 1]}{m_e c A \varepsilon_\nu^3} \sum_\xi \sum_{\xi'} (g_\xi - P_\xi) (E_{\xi'} - E_\xi)^3 \frac{P_{\xi'}}{g_{\xi'}} f_{\xi, \xi'} \psi_{\xi, \xi'} \delta_{l, l' \pm 1},$$

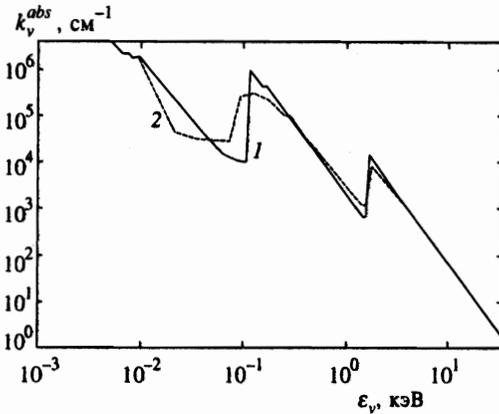


Рис. 10. Спектральный коэффициент поглощения k_{ν}^{abs} в холодном и плотном алюминии (кривая 1 построена по результатам расчетов в приближении среднего иона, кривая 2 — по данным из [20])

$$k_{\nu}^{fb} = \frac{8\pi^2\sqrt{2\pi}}{3\sqrt{3}m_e} \frac{e^{10}N_A^2\rho^2(Z)}{T^{3/2}cA^2\varepsilon_{\nu}^3} \sum_{\xi} (g_{\xi} - P_{\xi}) \exp\left(\frac{E_{\xi}}{T}\right) \frac{Z_n^4}{n^5} \theta(\varepsilon_{\nu} - |E_{\xi}|).$$

Полный спектральный коэффициент излучения равен

$$k_{\nu}^{emi} = (k_{\nu}^{ff} + k_{\nu}^{fb}) \left[1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\nu}}{T}\right)\right] + k_{\nu}^{emi bb}.$$

Определенный таким образом спектральный коэффициент излучения связан со спектральной мощностью излучения единицы объема вещества J_{ν} следующим соотношением:

$$J_{\nu} = ck_{\nu}^{emi}U_{\nu}^{Pl},$$

где

$$U_{\nu}^{Pl} = \frac{\varepsilon_{\nu}^3}{\pi^2\hbar^3c^3} \frac{1}{\exp(\varepsilon_{\nu}/T) - 1}$$

— функция Планка.

На рис. 10 представлены результаты расчетов спектральных коэффициентов поглощения для алюминия при температуре $T = 0.01$ кэВ и плотности $\rho = 2.7$ г/см³. Для сравнения приведены спектральные коэффициенты поглощения холодного и плотного алюминия, полученные в [20]. Неплохое согласие результатов наблюдается во всей части спектра, где проводились расчеты (10 эВ $< \varepsilon_{\nu} < 30$ кэВ).

При расчете спектральных характеристик горячей плазмы важное значение имеет вид контура линий, а также его ширина. Наиболее простым видом контура, который использовался в [9], является лоренцевский контур:

$$\psi_{\xi, \xi'} = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{\xi, \xi'}}{(E_{\xi'} - E_{\xi} - \varepsilon_{\nu})^2 + \gamma_{\xi, \xi'}^2}, \tag{10}$$

$$\gamma_{\xi, \xi'} = \sqrt{(\gamma_{\xi, \xi'}^N)^2 + (\gamma_{\xi, \xi'}^D)^2 + (\gamma_{\xi, \xi'}^C)^2},$$

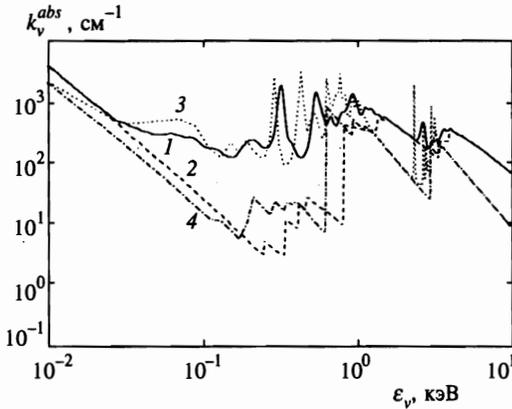


Рис. 11. Спектральные коэффициенты поглощения k_ν^{abs} в золоте при температуре $T = 0.1$ кэВ и плотности $\rho = 0.1$ г/см³: 1, 2 — коэффициенты поглощения с учетом линий и без учета линий, вычисленные в приближении локального термодинамического равновесия (результаты из работы [9]); 3, 4 — соответствующие результаты расчетов данной работы с контуром (10)

где $\gamma_{\xi, \xi'}$ — полная ширина контура линии, а $\gamma_{\xi, \xi'}^N, \gamma_{\xi, \xi'}^D, \gamma_{\xi, \xi'}^C$ — соответственно радиационное, доплеровское и ударное уширения линии.

На рис. 11 приведены результаты расчетов спектральных коэффициентов поглощения по изложенной выше модели среднего иона с учетом l -расщепления для золотой плазмы при температуре $T = 0.1$ кэВ и плотности $\rho = 0.1$ г/см³. Здесь же приведены результаты работы [9]. В целом наблюдается качественное согласие между нашими расчетами и данными из [9]. Различия в положениях скачков поглощения и линий связаны с тем, что при указанной плотности и температуре скорость ударных процессов недостаточна для установления локального термодинамического равновесия. Расчет [9], проведенный в приближении локального термодинамического равновесия, как показано выше, дает более высокие значения среднего заряда плазмы и, следовательно, приводит к сдвигу уровней в более жесткую сторону.

Характерные значения ширины линий при температуре $T \approx 0.1$ кэВ и плотности плазмы $\rho \approx 0.1$ г/см³ составляют несколько электронвольт. Вместе с тем известно [21], что в плазме с большим значением Z термодинамические флуктуации чисел заполнения будут приводить к сдвигам уровней сравнимым с энергией связи. В предположении статистической независимости флуктуаций чисел заполнения различных уровней это будет приводить к эффективному уширению контура линии. Как показано в [21, 22], контур линий в этом случае будет иметь вид доплеровского:

$$\psi_{\xi, \xi'} = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta E_{\xi, \xi'})^2}} \exp \left[-\frac{(E_{\xi'} - E_{\xi} - \epsilon_\nu)^2}{2(\Delta E_{\xi, \xi'})^2} \right],$$

где ширина контура $\Delta E_{\xi, \xi'}$ связана со среднеквадратичными значениями флуктуаций энергий уровней δE_{ξ} выражением

$$(\Delta E_{\xi, \xi'})^2 = \langle (\delta E_{\xi'} - \delta E_{\xi})^2 \rangle. \tag{11}$$

В рассматриваемом здесь приближении среднего иона можно выразить ширину контура линии (11) через производные энергий соответствующих состояний по населенности:

$$(\Delta E_{\xi, \xi'})^2 = \sum_{\xi''} \left(\frac{\partial E_{\xi'}}{\partial P_{\xi''}} - \frac{\partial E_{\xi}}{\partial P_{\xi''}} \right)^2 \langle (\delta P_{\xi''})^2 \rangle = \sum_{\xi''} \left(\frac{\partial E_{\xi'}}{\partial P_{\xi''}} - \frac{\partial E_{\xi}}{\partial P_{\xi''}} \right)^2 P_{\xi''} \left(1 - \frac{P_{\xi''}}{g_{\xi''}} \right). \tag{12}$$

Так, для модели иона без учета расщепления по орбитальным квантовым числам (Н-модель), дифференцируя (6), получим

$$\frac{\partial E_n}{\partial P_m} = 2I_H \begin{cases} \frac{Z_n}{n^2} \sigma_{nm} - \sum_{k \geq n} \sigma_{kn} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{kn}\right) \sigma_{km} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{km}\right) \frac{P_k}{k^2}, & m \leq n, \\ \frac{Z_m}{m^2} \sigma_{mn} - \sum_{k \geq m} \sigma_{kn} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{kn}\right) \sigma_{km} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{km}\right) \frac{P_k}{k^2}, & m \geq n. \end{cases} \quad (13)$$

Аналогичным образом можно найти выражение ширины контура линии (11) и в случае, когда учитывается l -расщепление (L -модель), которые имеют довольно громоздкий вид.

Таблица 4

Параметры переходов, рассчитанные
различными методами

Переход	Энергия перехода, эВ		$\Delta E_{\xi, \xi'}$, эВ	
	[22]	(6)	[22]	(12), (13)
1 → 2	6339	6454	57.7	24.8
1 → 3	7128	7272	97.3	50.4
1 → 4	7307	7459	117.6	67.8
2 → 3	886.5	819	41.4	26.2
2 → 4	1066	1006	67.7	44.9
3 → 4	210.8	187.3	27.8	19.5

В табл. 4 приведены энергии различных переходов, а также значения ширины контуров линий, рассчитанные по формулам (6), (12), (13), для плазмы железа при температуре $T = 200$ эВ и плотности $\rho = 7.8$ г/см³. Здесь же для сравнения приведены энергии соответствующих переходов и значения ширин из [22], полученные в модели Томаса–Ферми. Из сравнения видно, что вычисления энергии перехода в модели среднего иона с удовлетворительной точностью согласуются с квантовомеханическими расчетами. Для большинства переходов различие в энергии перехода не превышает 2% и только для перехода 3 → 4 это различие составляет около 10%. Однако значения ширины линий отличаются почти в два раза, хотя качественно изменение ширины линии с изменением перехода согласуется с данными работы [22].

На рис. 12 приведены спектральные коэффициенты поглощения в линиях для золотой плазмы при температуре $T = 0.75$ кэВ и плотности $\rho = 1.9$ и 19 г/см³. Кривые 2, 3 отвечают случаю точного расчета ширины линий по формулам (12), (13), в то время как кривая 4 получена для случая, когда точные ширины увеличены в два раза. Для сравнения на рисунке приведены результаты работы [21] (кривая 1), где расчеты проводились по модели Хартри–Фока.

Проведенные исследования показали, что использование приближения среднего иона для расчета кинетики ионизации высокотемпературной многозарядной плазмы дает удовлетворительные результаты при определении термодинамических и спектральных характеристик такой плазмы. Развитый подход может быть использован в совместных расчетах кинетики и радиационной газовой динамики.

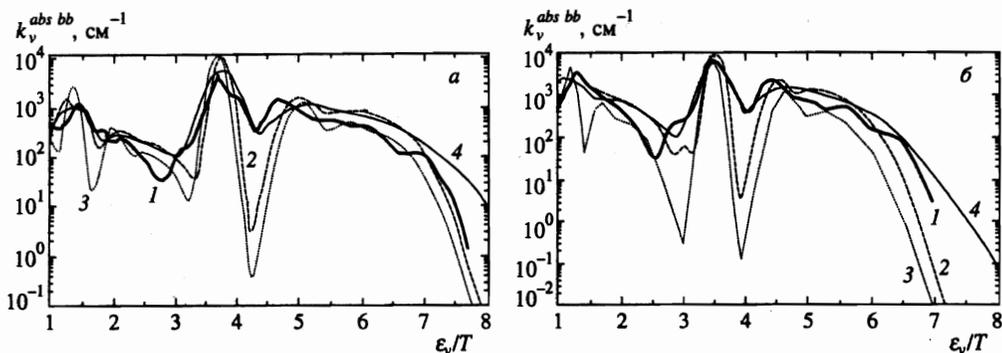


Рис. 12. Спектральный коэффициент поглощения в линиях для плазмы золота при температуре $T = 750$ эВ и плотности $\rho = 1.9$ г/см³ (а), $\rho = 19$ г/см³ (б): 1 — расчет из работы [21], 2, 3 — расчет по модели среднего иона соответственно с учетом и без учета l -расщепления с ширинами (12), (13), 4 — расчет по модели среднего иона с учетом l -расщепления с ширинами, увеличенными в два раза

В заключение авторы выражают благодарность Международному научно-техническому центру за поддержку данной работы в рамках проекта МНТЦ № 76.

Литература

1. В. Эбелинг, В. Крефт, Д. Кремп, *Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле*, Мир, Москва (1979).
2. M. Itoh, T. Yabe, and S. Kiyokawa, *Phys. Rev. A* **35**, 233 (1987).
3. С. А. Бельков, Г. В. Долголева, *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов*, вып. 1, 59 (1992).
4. J. C. Slater, *Phys. Rev.* **36**, 57, (1930).
5. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров, *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Методики и программы численного решения задач математической физики*, вып. 2(6), 16 (1979).
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматгиз, Москва (1963), с. 695.
7. R. M. More, *JQSRT* **27**, 345 (1982).
8. F. Perrot, *Phys. Scripta* **39**, 332 (1989).
9. A. Rickert and J. Meyer-ter-Vehn, *Laser and Particle Beams* **8**, 715 (1990).
10. G. Faussurier, C. Blancard, and A. Decoster, in *Laser Interaction with Matter (Proc. of the 23rd European Conference, St. John's College, Oxford, 19-23 September 1994)*, ed. by S. J. Rose, Rutherford Laboratory, Chilton, Didcot, Oxfordshire, UK (1995), p. 239.
11. К. У. Аллен, *Астрофизические величины*, Мир, Москва (1977).
12. W. A. Lokke and D. E. Post, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* **20**, 397 (1977).
13. W. Lotz, *Z. Phys.* **216**, 241 (1968).
14. M. J. Seaton, in *Atomic and Molecular Processes*, ed. by D. R. Bates, Academ. Press, New York (1962), p. 375.
15. R. W. P. McWhirter, in *Plasma Diagnostics*, ed. by R. H. Huddlestone and S. L. Leonard, Academ. Press, New York (1965).
16. R. K. Landshoff and J. D. Perez, *Phys. Rev. A* **13**, 1619 (1976).
17. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).

18. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960).
19. Н. С. Бахвалов, *Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения)*, Наука, Москва (1973).
20. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* **54**, 181 (1993).
21. В. В. Драгалов, А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров, *Физика плазмы* **16**, 77 (1990).
22. T. Blenski and V. Cichocki, *Phys. Rev. A* **41**, 6973 (1990).