


Расчёты спектральных и средних коэффициентов поглощения фотонов на основе модели ионизационного равновесия плазмы

М.Е. Березовская, С.В. Кольчугин, А.С. Королёв, П.А. Лобода, А.А. Овечкин, В.В. Попова, А.А. Шадрин

Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики им. акад. Е.И. Забабахина

Модель CP-SC [*]

$F(\vec{N}; \rho, T)$ – свободная энергия Гельмгольца смеси ионов различных сортов и электронов

$$\min_{\vec{N}} F(\vec{N}; \rho, T)$$


Уравнения ионизационного равновесия

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{c_Q}{c_{Q-1}} = \frac{U_Q}{U_{Q-1}} \exp(-\beta \Delta \tilde{\mu}_Q), \quad \beta = 1/T, \\ \sum_Q c_Q (Z - Q) = \frac{\sqrt{2} T^{3/2}}{\pi^2 n_i} I_{1/2}(\beta \mu_e), \quad n_i = \frac{\rho N_A}{A}, \\ \sum_Q c_Q = 1. \end{array} \right.$$



суперконфигурационное приближение [**, **] для статсумм

$$U_Q = \sum_{i \in Q} g_i \exp(-\beta (E_i - \mu_e Q))$$

* P.A. Loboda, V.V. Popova, A.A. Shadrin. Contrib. Plasm. Phys. **29**, 3 – 12 (2009).

** A. Bar-Shalom, J. Oreg, W.H. Goldstein, D. Shvarts, A. Zigler. Phys. Rev. A **40**, 3183 – 3193 (1989).

*** F. Gilleron, J.-C. Pain. Phys. Rev. E **69**, 056117 (2004).

Модель CP-SC

- Кулоновское взаимодействие и конечные размеры ионов (слагаемые в $\Delta\tilde{\mu}_Q$)
- Вырождение электронов (не предполагается $\exp(-\beta\mu_e) \gg 1$)
- Вклад возбуждённых состояний ионов в статсуммы U_Q в суперконфигурационном приближении)
- Вероятности $w_s^{(Q)}(\rho, T)$ существования одноэлектронных состояний при учёте плазменного микрополя ($\tilde{\varepsilon}_s^{(Q)} = \varepsilon_s^{(Q)} - T \ln w_s^{(Q)}$)

Модель CP-SC. Входные величины – атомные данные для изолированных ионов

$\langle r \rangle^{(Q)}$ – энергия электрона на подболочке *в кулоновском поле ядра*

$\langle r, s \rangle^{(Q)}$ – матричный элемент парного взаимодействия электронов

$$\varepsilon_r^{(Q)} = \langle r \rangle^{(Q)} + \sum_s (q_s^{(Q)} - \delta_{rs}) \langle r, s \rangle^{(Q)}, \quad q_s^{(Q)} - \text{числа заполнения подболочек в}$$

«конфигурации-представителе» Q -электронного иона

слэтеровские интегралы, матричные элементы радиационных переходов ...

CATS [*]

метод Хартри-Фока с релятивистскими поправками

FAC [**]

последовательное релятивистское описание на основе решения уравнения Дирака с параметрическим потенциалом (строится на основе решения системы уравнений Дирака для конфигурации-представителя)

* R.D. Cowan. The theory of atomic structure and spectra. Berkeley, University of California press, 1981.

** M.F. Gu. Astrophys. J. 582, 1241-1250 (2003).

Ионный состав плазмы

Относительная концентрация ионов с Q связанными электронами:

$$c_Q = \frac{U_Q}{\sum_{Q'} U_{Q'}}$$

Модель среднего атома RESEOS [*]

$$U_Q = \sum_{C: \sum_s q_s = Q} \exp(-\beta(E_C - \mu_e Q)) \prod_s \binom{g_s}{q_s}, \quad E_C = \sum_s q_s \varepsilon_s + E_{\Xi}^{(1)}$$

«Химическая» модель CP-SC

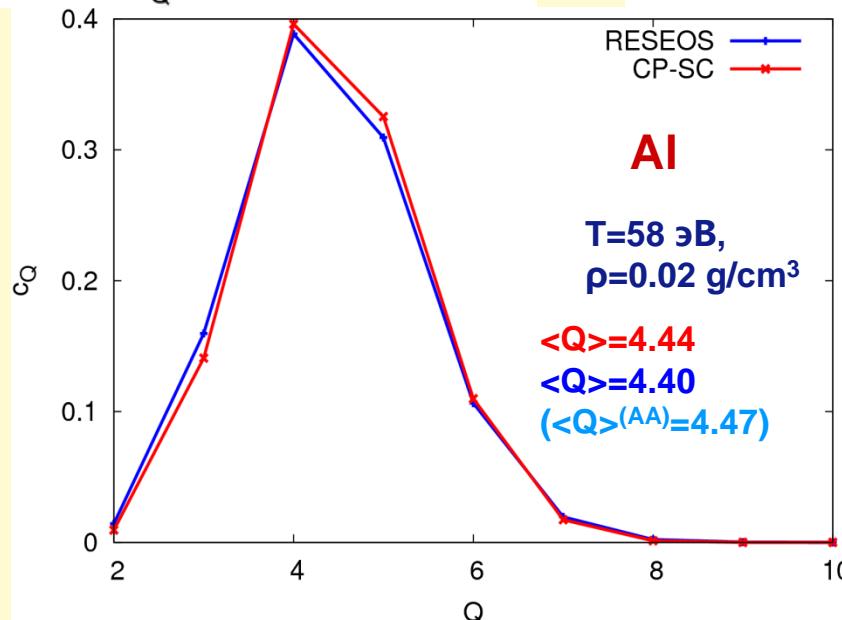
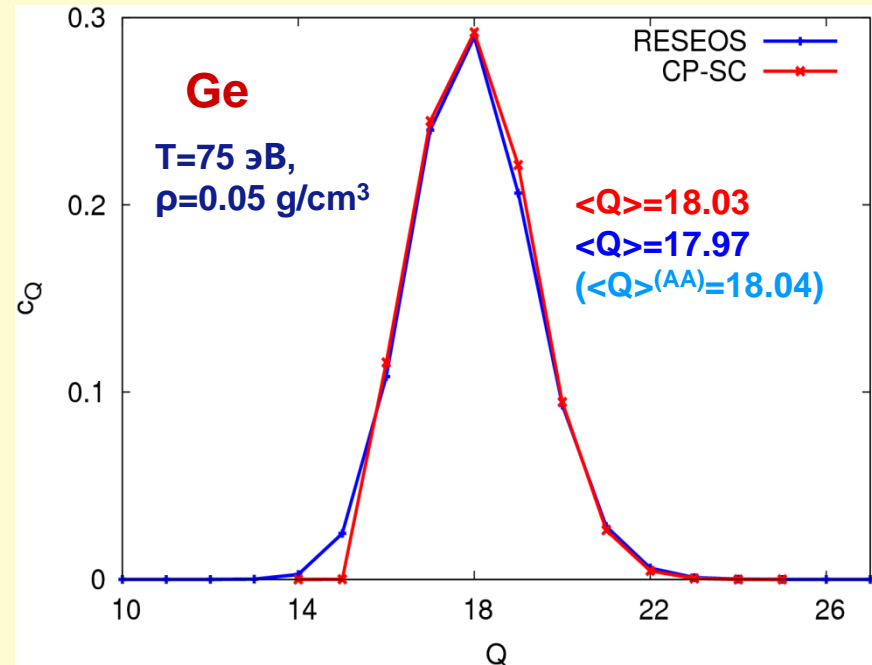
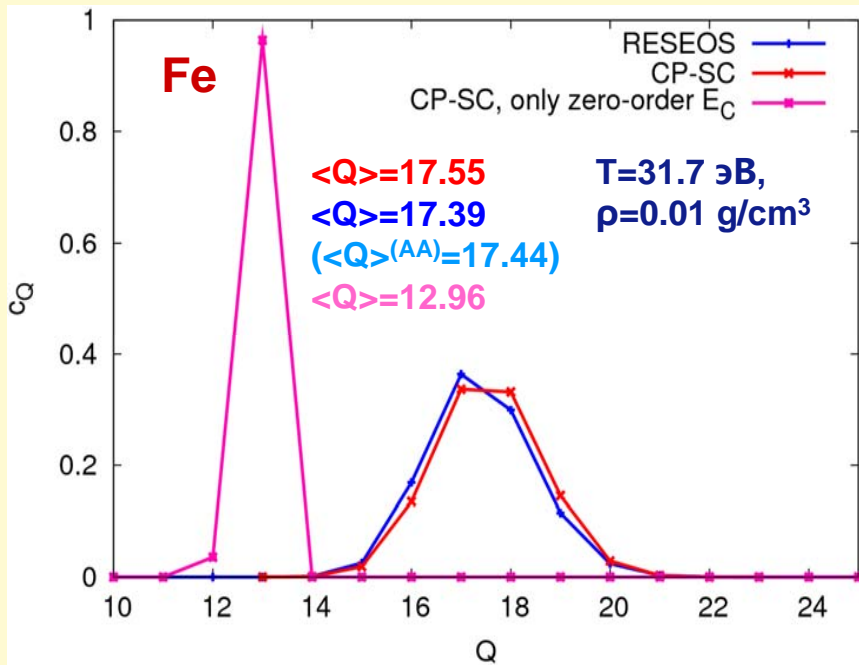
$$E_C^{(0)} = \sum_s q_s \tilde{\varepsilon}_s^{(Q)}, \quad E_C^{(1)} = \sum_s q_s (\varepsilon_s^{(C)} - \varepsilon_s^{(Q)}) - \frac{1}{2} \sum_{rs} q_r (q_s - \delta_{rs}) \langle r, s \rangle^{(Q)}$$

$C_0^{(Q)}$ – основная конфигурация Q -электронного иона

$$\frac{U_Q}{U_{Q-1}} = \frac{\sum_{C: \sum_s q_s = Q} \exp(-\beta(E_C - E_{C_0^{(Q)}} - \mu_e Q)) \prod_s \binom{g_s}{q_s}}{\sum_{C: \sum_s q_s = Q-1} \exp(-\beta(E_C - E_{C_0^{(Q-1)}} - \mu_e (Q-1))) \prod_s \binom{g_s}{q_s}} \cdot \underbrace{\exp(\beta(E_{C_0^{(Q-1)}} - E_{C_0^{(Q)}}))}_{E_{C_0^{(Q-1)}} - E_{C_0^{(Q)}} =}$$

$$E_C - E_{C_0^{(Q)}} \rightarrow E_C^{(0)} - E_{C_0^{(Q)}}^{(0)}, \quad E_C - E_{C_0^{(Q-1)}} \rightarrow E_C^{(0)} - E_{C_0^{(Q-1)}}^{(0)} \Bigg| = E_{C_0^{(Q-1)}}^{(0)} + E_{C_0^{(Q-1)}}^{(1)} - (E_{C_0^{(Q)}}^{(0)} + E_{C_0^{(Q)}}^{(1)})$$

Ионный состав плазмы

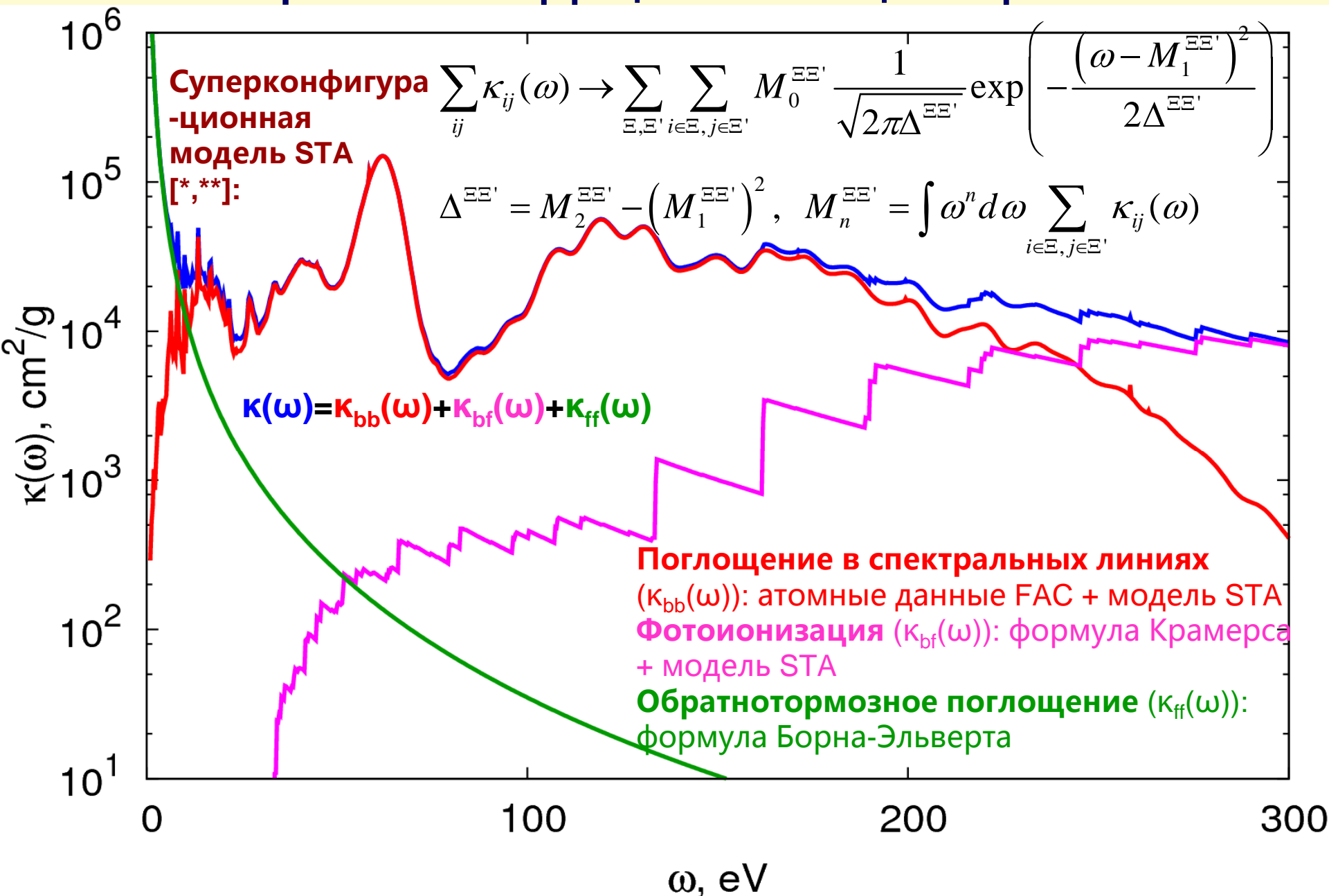


Частичный учёт поправки первого порядка к энергии конфигурации в модели CP-SC даёт хорошие результаты, но в дальнейшем необходим её последовательный учёт [*]

$\langle Q \rangle^{(AA)}$ – исходное среднее число связанных электронов в модели среднего атома

* A.A. Shadrin, A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, V.V. Popova. The ionization equilibrium of dense multielectron-ion plasmas based on the chemical-picture representation using the modified superconfiguration approach. Workshop on radiative properties of hot dense matter, Vienna, 2014.

Спектральный коэффициент поглощения фотонов



* A. Bar-Shalom, J. Oreg, W.H. Goldstein, D. Shvarts, A. Zigler. Phys. Rev. A **40**, 3183 – 3193 (1989).

** A. Bar-Shalom, J. Oreg, W.H. Goldstein. Phys. Rev. E **51**, 4882 – 4890 (1995).

Коэффициенты поглощения фотонов

CP-SC

RESEOS



Релаксация орбиталей



Отдельные наборы волновых функций электронов и соответствующих атомных данных для различных сортов ионов

Один набор волновых функций в приближении среднего атома для всех сортов ионов



Плотностные эффекты



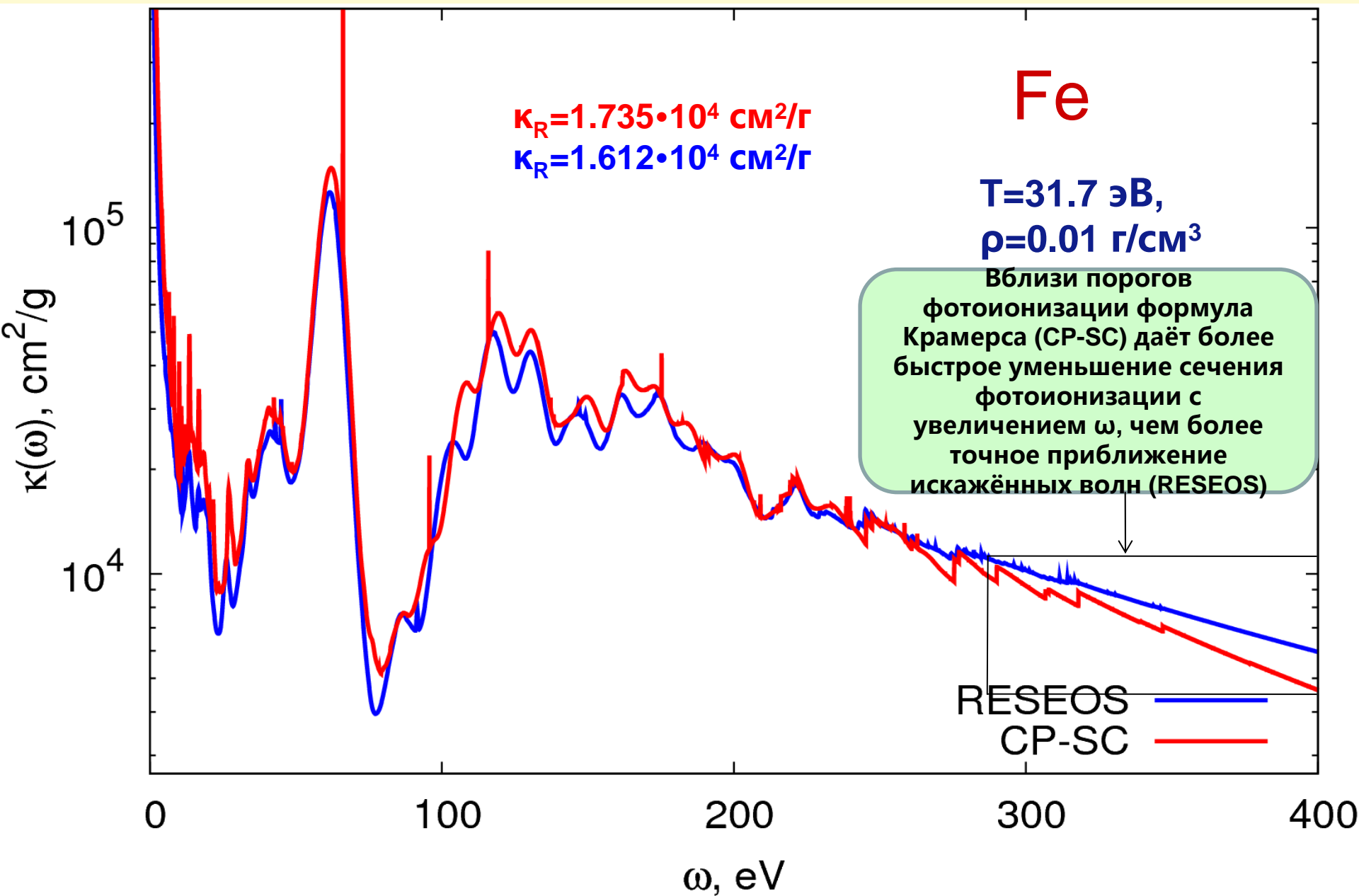
Зависимость ионного состава от ρ и T , вероятности существования одноэлектронных состояний $w_s^{(e)}(\rho, T)$, снижение потенциалов ионизации при увеличении плотности $\Delta\tilde{\mu}_0$

Отдельный самосогласованный потенциал электронов для каждого значения ρ и T

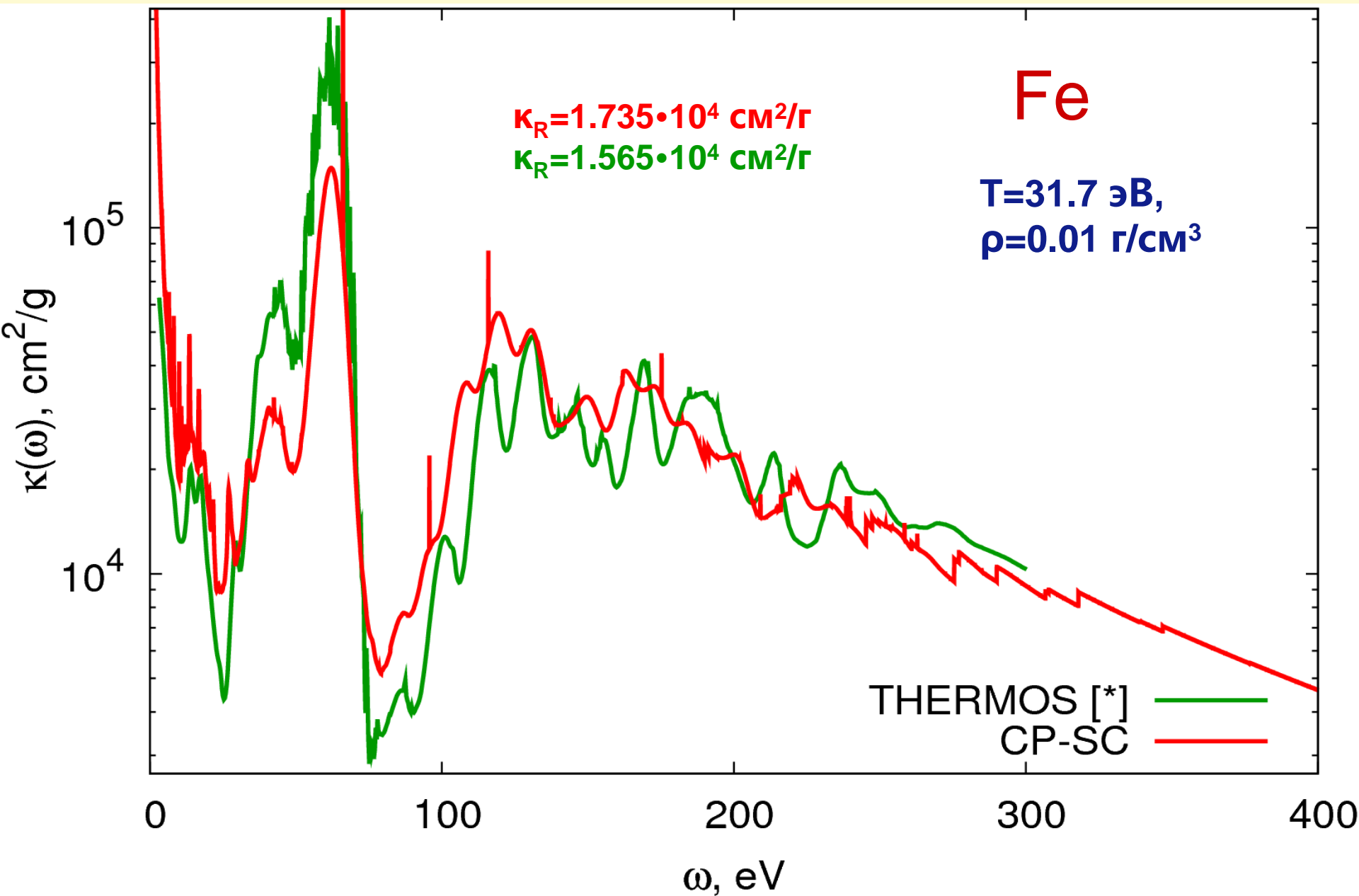
Зависимость волновых функций электронов от ρ и T



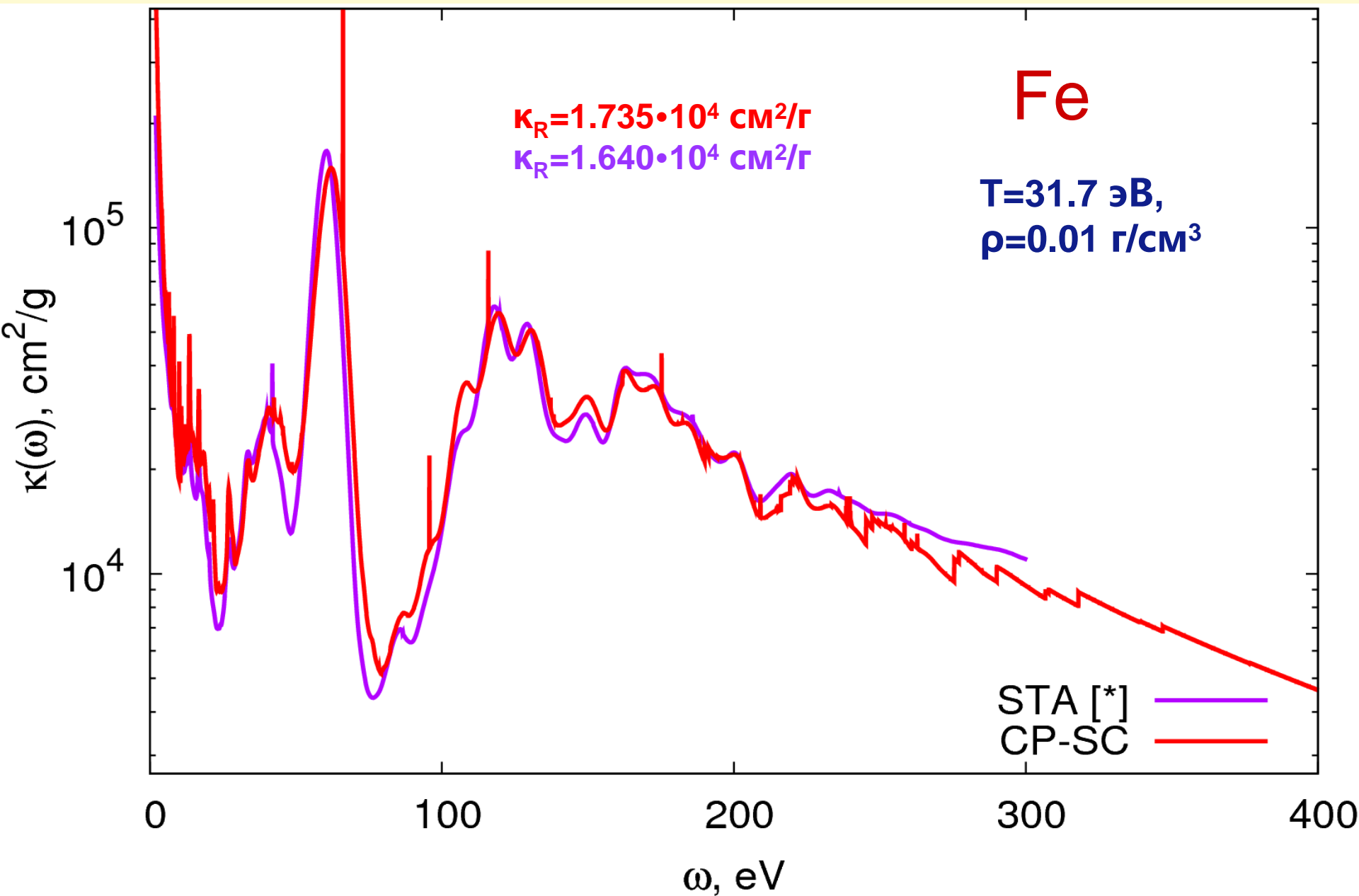
Спектральные коэффициенты поглощения. CP-SC vs RESEOS



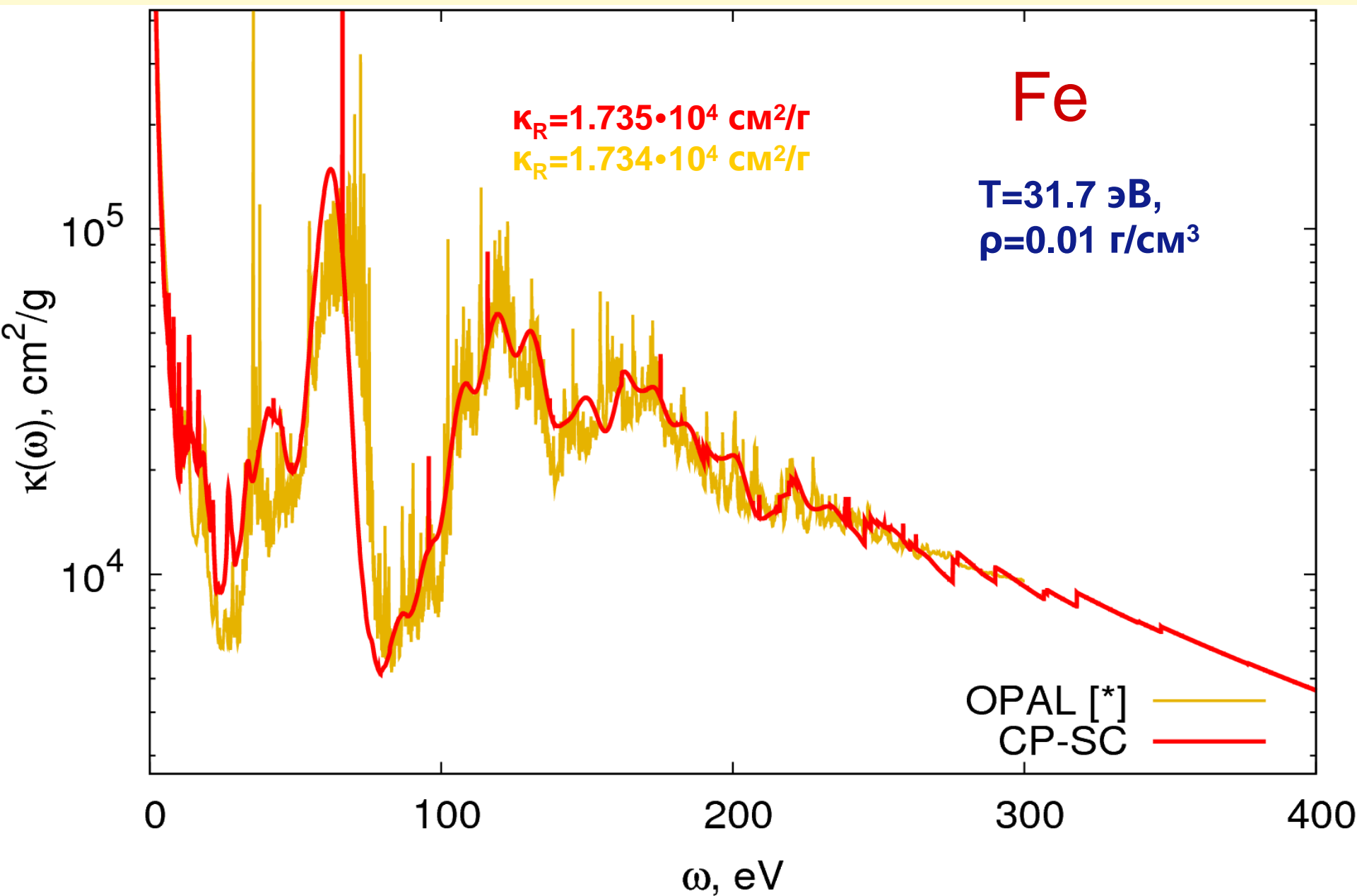
Спектральные коэффициенты поглощения. CP-SC vs THERMOS



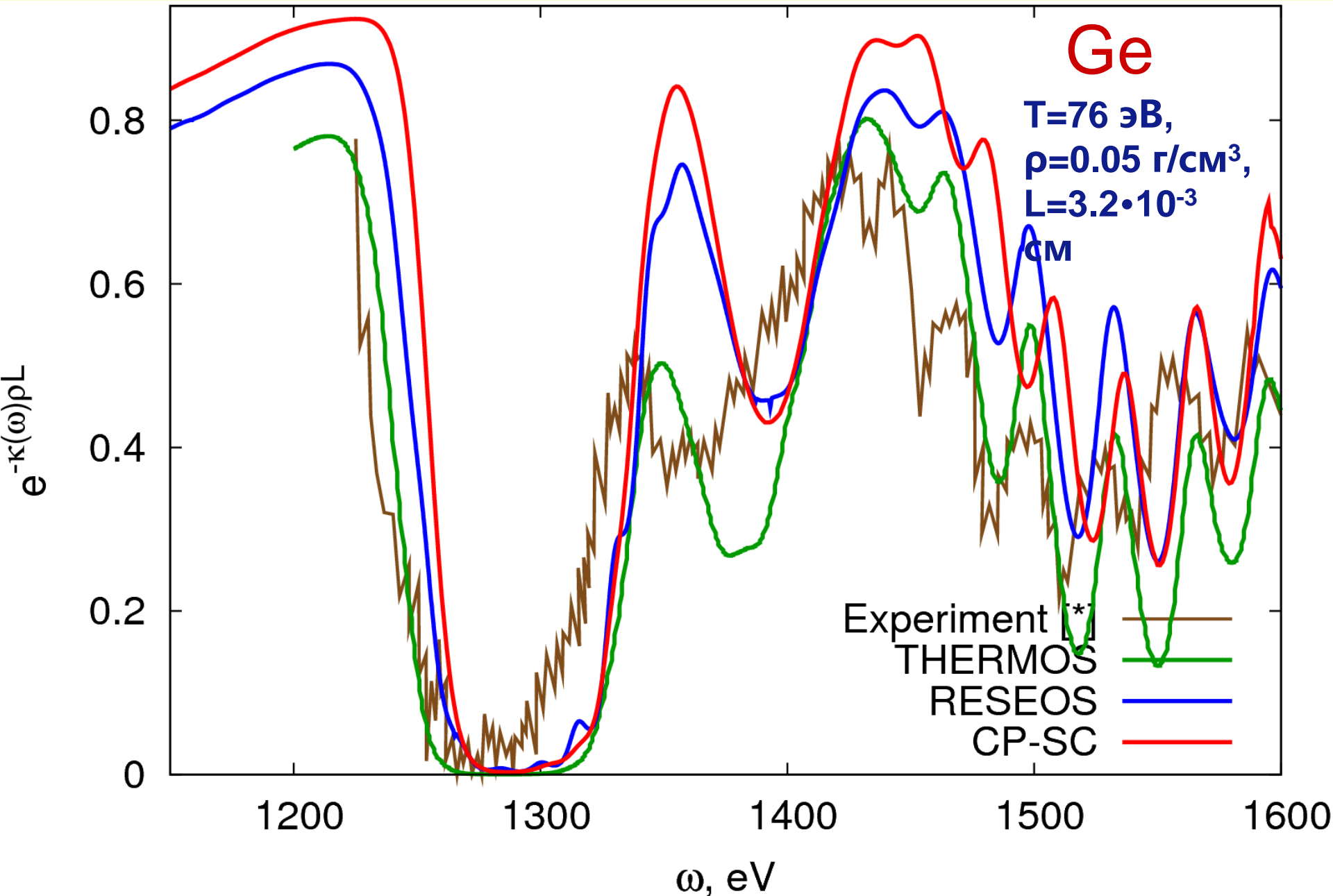
Спектральные коэффициенты поглощения. CP-SC vs STA



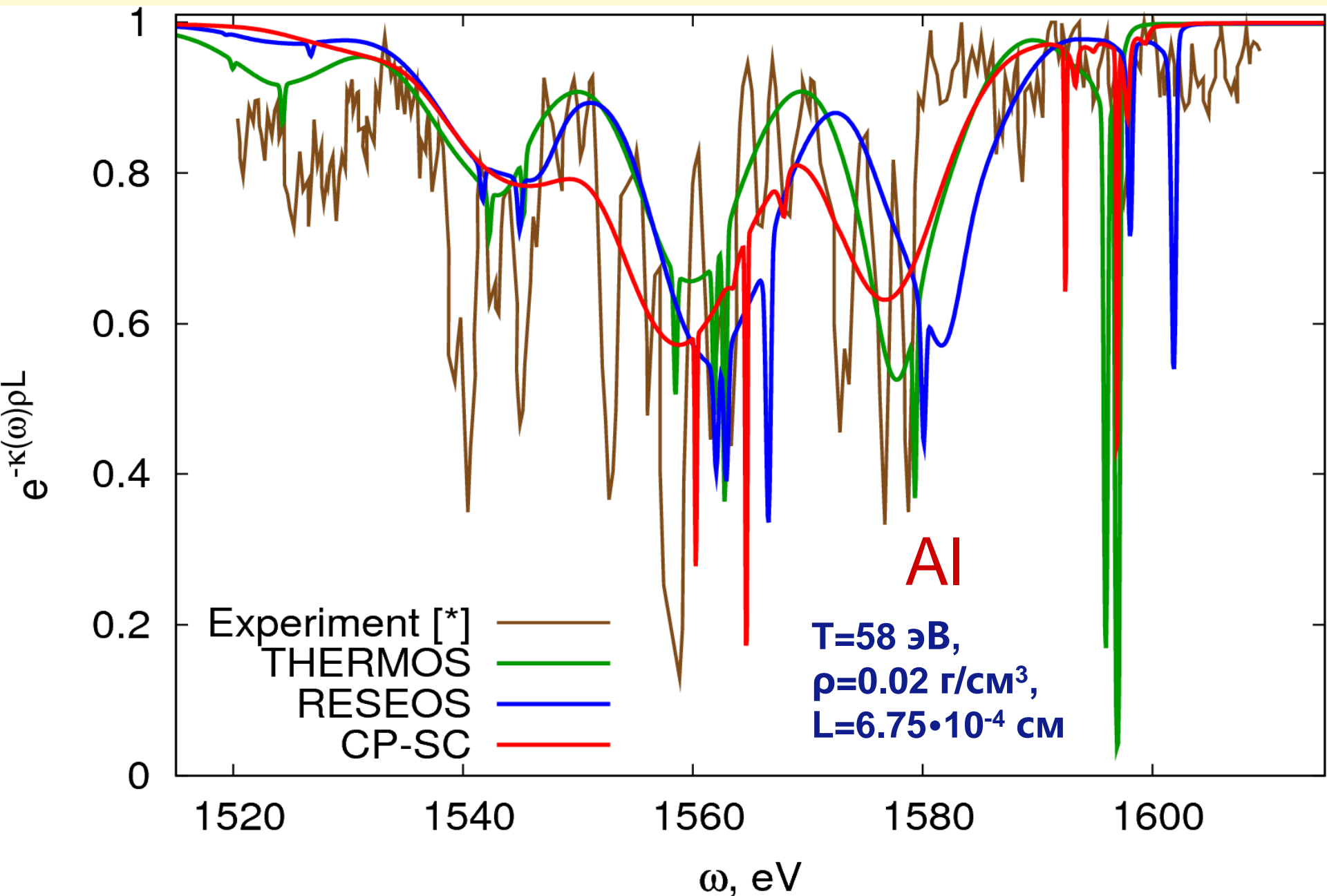
Спектральные коэффициенты поглощения. CP-SC vs OPAL



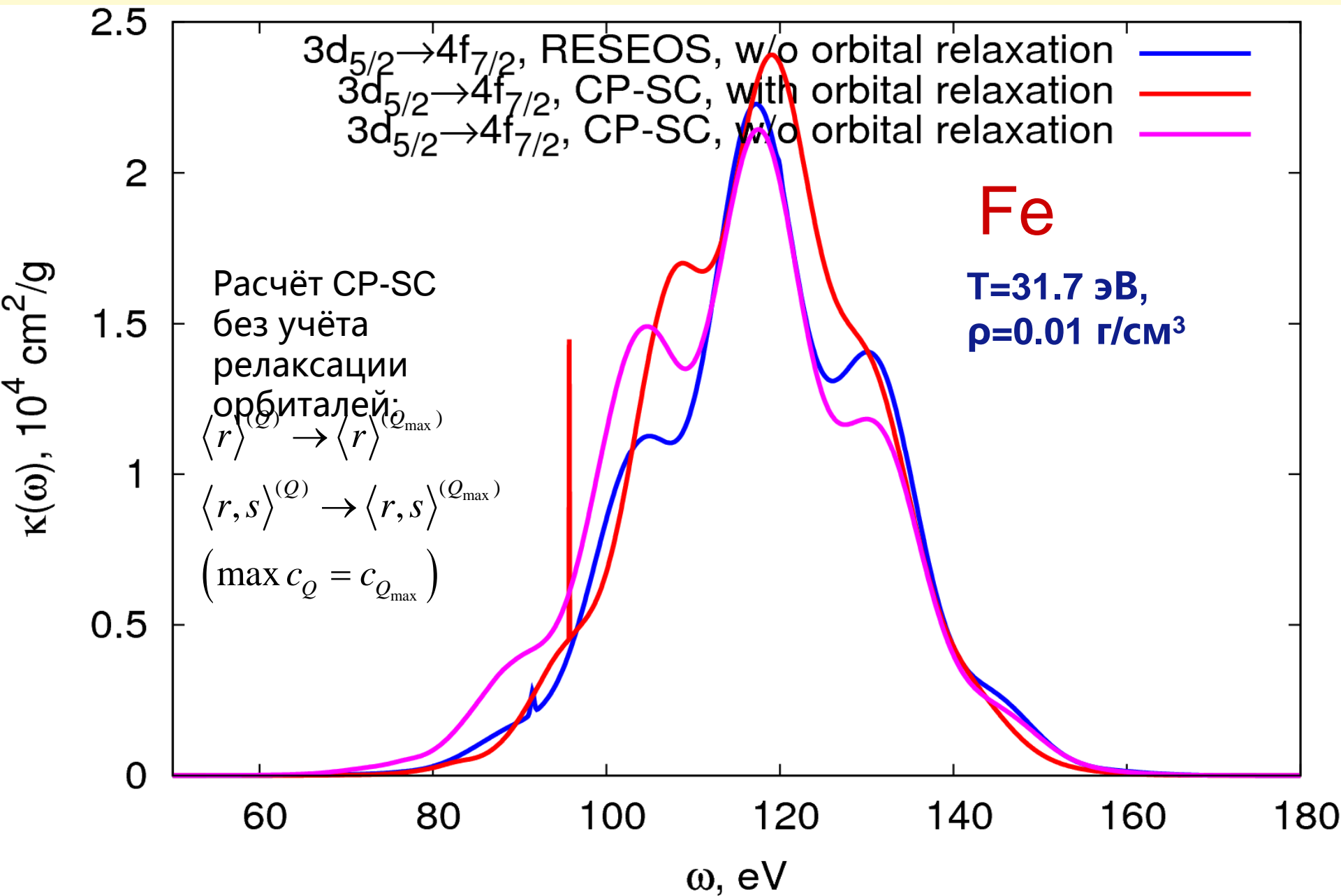
Спектральные коэффициенты прохождения



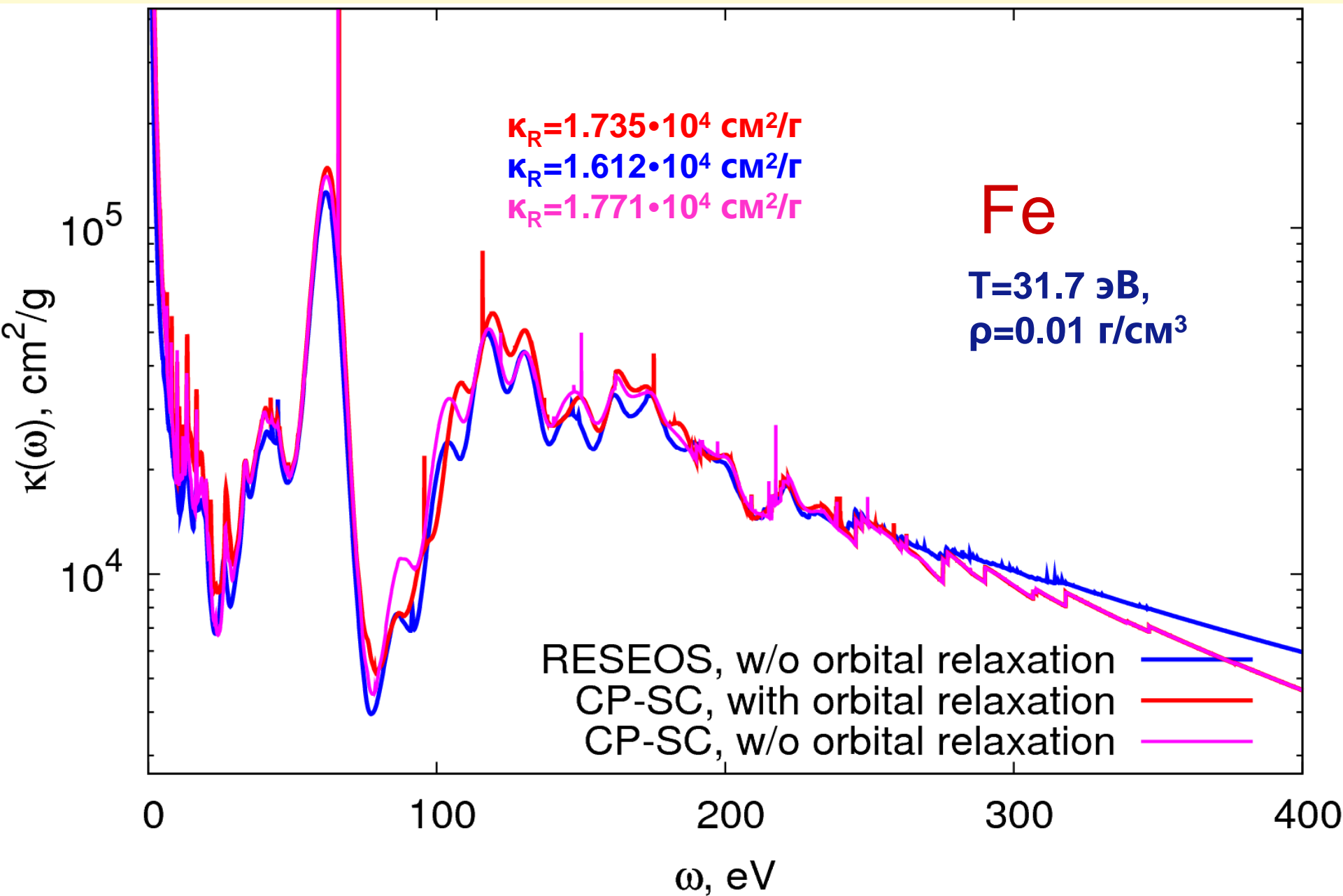
Спектральные коэффициенты прохождения



Влияние релаксации орбиталей на спектральные коэффициенты поглощения



Влияние релаксации орбиталей на спектральные коэффициенты поглощения



Выводы

1. Результаты расчётов ионного состава и спектральных коэффициентов поглощения фотонов по «химической» модели CP-SC в целом хорошо согласуются с данными других современных моделей вещества, в том числе основанных на моделях среднего атома.
2. Частичный учёт поправки первого порядка к энергии конфигурации, реализованный в модели CP-SC, позволяет проводить расчёты при достаточно низких температурах (порядка десяти эВ) и не увеличивает время счёта по сравнению с нулевым порядком для энергии конфигурации, дающим нефизичные результаты при таких температурах.
3. Планы:
 - Полный учёт поправки первого порядка к энергии конфигурации.
 - Сечение фотоионизации в приближении искажённых волн.