РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

# Теоретическое моделирование теплофизических свойств и линейчатых спектров излучения плотного ионизованного вещества

**П.А. Лобода, А.А. Овечкин, А.Л. Фальков, А.С. Королёв, А.Ю. Летунов, А.А. Новиков, Н.Г. Карлыханов, Ф.А. Сапожников, С.В. Кольчугин, М.Е. Березовская**

Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. акад. Е.И. Забабахина», Снежинск

E-mail: p.a.loboda@vniitf.ru

**Задачи основной тематики РФЯЦ-ВНИИТФ и смежные научные проблемы:**

- уточнение ф.-м. описания процессов при работе изделий специальной техники,
- интерпретация результатов специализированных натурных экспериментов,
- исследования по физике высоких плотностей энергии,
- рентгеновская спектроскопия плазмы,
- разработка лазер-плазменных источников рентгеновского излучения высокой яркости.

- **Методики вычисления атомных характеристик произвольных многоэлектронных ионов с необходимой точностью.**
- **Теоретические модели реалистического представления плотного ионизованного вещества, согласованного описания его теплофизических свойств в широкой области плотностей и температур:**
  - **термодинамических,**
  - **оптических,**
  - **диэлектрических,**
  - **транспортных,**
  - **структурных,**
  - **тормозных потерь быстрых ионов.**
- **Теоретические модели описания спектральных радиационных характеристик (не)равновесной высокотемпературной плазмы.**

# Атомные характеристики

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

***Атомные характеристики = спектроскопические константы атомов и ионов + сечения и скорости элементарных процессов с их участием***

**Усовершенствованные авторские версии пакетов программ GRASP, GRASP$^2$ и FAC, реализующие многоконфигурационный метод Дирака-Фока и последовательное релятивистское описание с параметрическим локальным потенциалом.**

**Методы учёта корреляционных эффектов в спектрах многоэлектронных ионов для крупномасштабных вычислений и отдельных прецизионных расчётов.**

K.G. Dyall et al. CPC **55**, 425 (1989);
F.A. Parpia, C.F. Fischer, I.P. Grant. CPC **94**, 249 (1996).
M.F. Gu. Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).

J. Nilsen, …, P.A. Loboda *et al*. PRA **50**, 2143 (1994).
P.A. Loboda *et al*. Proc. SPIE **2520**, 69 (1995).

- **Согласованные данные по спектроскопическим константам и скоростям элементарных процессов для многоэлектронных ионов с необходимой точностью: атомные модели для исследования плазменных резонансных сред и задач рентгеновской спектроскопии плазмы, наполнение баз данных;**
- **одно- и двух-частичные атомные характеристики электронных орбиталей многоэлектронных ионов: модели статистического описания теплофизических свойств плотного ионизованного вещества.**

V.Yu. Politov, P.A. Loboda, V.A. Lykov, J. Nilsen. Opt. Comm. **108**, 283 (1994).
П.А. Лобода. В сб. тезисов VII ЗНЧ, с. 101 (2003).
O.B. Rosmei, …, P.A. Loboda *et al*. LPB **23**, 79 (2005).
П.А. Лобода. В сб. тезисов XIV ЗНЧ, с. 101 (2019).

A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.S. Korolev *et al*. MRE **7**, 064401 (2022).

# Атомные характеристики

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

**Создана информационно-справочная система по свойствам спектров атомов и ионов SPECTR-W$^3$ : http://spectr-w3.snz.ru (> 450000 записей)**

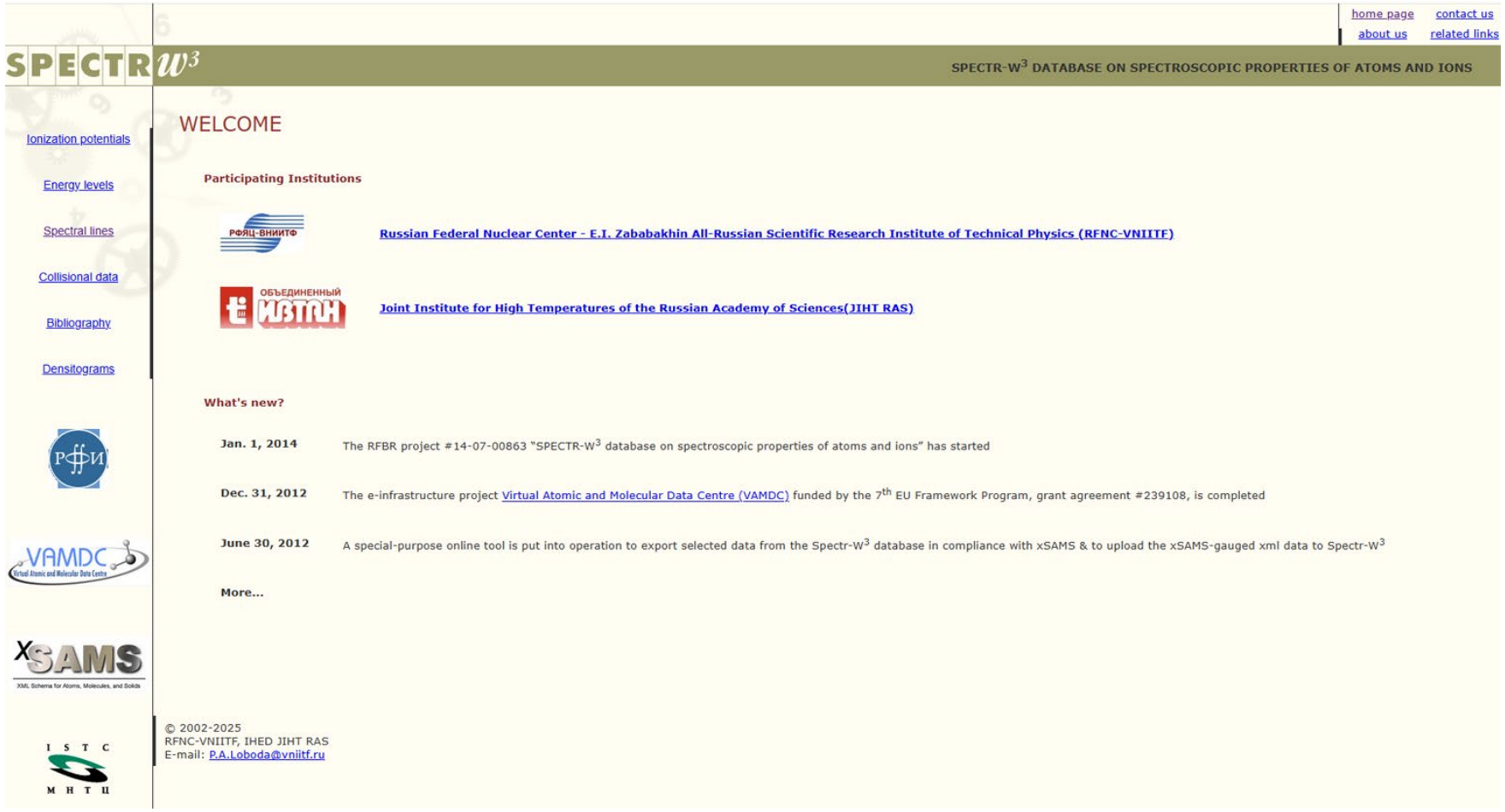
**SPECTR-W$^3$: интерактивный общедоступный Web-ресурс на основе фактографической базы атомных данных SPECTR-W$^3$ — с ноября 2002 г. Разработана и развивается совместно с ОИВТ РАН.**

- **крупнейшая в мире БД по свойствам спектров многозарядных ионов,**
- **единственная работающая российская база по числовым данным для атомов и ионов,**
- **включена в поисковые системы МАГАТЭ (GENIE) и международного научного консорциума, «Виртуальный центр по атомным и молекулярным данным» (VAMDC),**
- **даёт возможность представления результатов запросов в соответствии с разработанным международным стандартом для обмена атомными и молекулярными данными XSAMS.**
- **включает большой объём результатов собственных расчётов спектроскопических констант многоэлектронных ионов,**
- **в составе рабочей группы МАГАТЭ разработана универсальная система описания характеристик спектров атомов и ионов.**


A.Ya. Faenov, …, P.A. Loboda *et al*. AIP Conf. Proc. **636(1)**, 253 (2002).
I.Yu. Skobelev, P.A. Loboda *et al.* J.Phys: Conf. Ser. **653**, 012022 (2015).
И.Ю. Скобелев, П.А. Лобода и др. Оптика и спектроскопия **120**, 531 (2016).
Y. Ralchenko, …, P.A. Loboda *et al*. AIP Conf. Proc. **1125**, 207 (2009).
M.L. Dubernet, …, P.A. Loboda *et al*. JQSRT **111**, 2151 (2010).
G. Rixon, …, P.A. Loboda *et al*. AIP Conf. Proc. **1344**, 107 (2011).
M.L. Dubernet, …, P.A. Loboda *et al*. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **49**, 074003 (2016).
D. Albert, …, P.A. Loboda *et al*. Atoms. **8**, 76 (2020).

# Атомные характеристики

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ




## SPECTR-W$^3$

- **Данные расчетов, измерений, компиляций.**
- **Ссылки на первоисточники и необходимые комментарии.**

- потенциалы ионизации,
- энергии, статвеса, радиационные и автоионизационные ширины уровней,
- длины волн, вероятности и силы осцилляторов радиационных переходов, факторы интенсивности сателлитов,
- параметрам аппроксимаций сечений и скоростей столкновительных переходов в атомах и ионах аналитическими выражениями,
- экспериментальным спектрограммам рентгеновского излучения, зарегистрированных от различных плазменных источников.

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

**Модель ионизационного равновесия умеренно (слабо)-неидеальной плазмы многоэлектронных ионов CP-SC на основе «химического» (плазменного) представления — ансамбль ионов отдельных сортов с различным числом связанных электронов *Q*:**

- **учёт неидеальности — по ТВ: $\Delta F_C$ : аппроксимации данных расчётов методом Монте-Карло и в гиперцепном приближении†, обобщённые на случай неполной ионизации; $\Delta F_{HS}$ : модель твёрдых сфер;**
- **учёт вырождения свободных электронов (FEG);**
- **описание вклада связанных электронов в *F* на основе суперконфигурационного (SC) подхода‡ с учётом возмущения одноэлектронных связанных состояний плазменным ионным микрополем: формализм вероятностей заселения $w_s^Q(\rho,T)$¶**
  ➡ **зависимость статсумм супероболочек, SC и ионов от плотности и температуры (сделано впервые);**
- **последовательное применение SC подхода (модели STA) для статистического описания сложных спектров поглощения/излучения многоэлектронных ионов.**

$$\frac{c_Q}{c_{Q-1}} = \frac{U_Q(\mathbf{g})}{U_{Q-1}(\mathbf{g})} \exp[\beta(\mu_e - \Delta\tilde{\mu}_Q)],$$

$$Z - \sum_Q c_Q\, Q = \langle Z \rangle = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2\, \beta^{3/2}\, n_i} I_{1/2}(\beta\, \mu_e),$$

$$\sum_Q c_Q = 1.$$

$$\Delta\tilde{\mu}_Q = \left(\frac{\partial}{\partial c_Q} - \frac{\partial}{\partial c_{Q-1}} - \frac{\partial}{\partial \langle Z \rangle}\right) F_C - T \sum_{Q'} c_{Q'} \left(\frac{\partial}{\partial c_Q} - \frac{\partial}{\partial c_{Q-1}} - \frac{\partial}{\partial \langle Z \rangle}\right) \ln U_{Q'}$$

$$U_Q(\mathbf{g}) = \sum_{C \in Q} w_C\, e^{-\beta E_C} \prod_s w_s^{q_s} \qquad w_s = w_s^{(Q)}(\rho, T)$$

† G. Chabrier, A.Y. Potekhin. PRE **58**, 4941 (1998).
‡ A. Bar-Shalom *et al*. PRA **40**, 3183 (1989).
¶ D.G. Hummer, D. Mihalas. ApJ **331**, 794 (1988).

P.A. Loboda, V.V. Popova, A.A. Shadrin. CPP **49**, 738 (2009);
A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, V.V. Popova, et al. PRE **108**, 015207 (2023)

➡ **$\mu_e$, $n_e(r)$, $\{c_Q\}$, энергии и вероятности радиационных переходов, …**

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

**Модель RESEOS★ на основе одноцентрового ячеечного представления вещества. Средний атом в «желе» — учёт кулоновских корреляций за пределами ячейки: модели Либермана*, нейтральной ионной сферы†,‡ и Старретта-Саумона¶.**

$$\Delta V_{el}(r) = 4\pi\left(n_e(r) - \langle Z\rangle n_i(r) - Z\delta(\mathbf{r})\right), \quad \langle Z\rangle = \frac{n_e^0 \equiv \lim_{r\to\infty} n_e(r)}{n_i^0}, \; n_i^0 = \frac{\rho N_A}{A}$$

$n_i(r) = n_i^0\theta(r - r_0)$ : модели Либермана $\left(n_e(r) \equiv n_e^0, r > r_0\right)$ и нейтральной ионной сферы $\left(n_e(r) \to n_e^0, r \to \infty\right)$

$n_i(r) = n_i^0 g(r)$ : модель Старретта-Саумона; $g(r)$ — из решения уравнений Орнштейна-Цернике.

$$V(r) = V_{el}(r) + V_{xc}\left(n_e(r)\right) + \nu\left(n_e(r_0), n_e^0\right). \; \nu \neq 0$$ для модели Либермана.

Уравнения самосогласованного поля в релятивистском приближении для иона с наиболее вероятными при заданных ρ и T числами заполнения электронных оболочек:

$$\left(-ic\left(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\nabla\right) + c^2\left(\hat{\beta} - 1\right) + V(r)\right)\psi_\nu(\mathbf{r}) = \varepsilon_\nu\psi_\nu(\mathbf{r})$$

$$n_e(r) = \sum_\nu \frac{1}{1 + \exp\left(\beta\left(\varepsilon_\nu - \mu_e\right)\right)}\left|\psi_\nu(\mathbf{r})\right|^2$$

**$\mu_e$, $n_e(r)$, $\{c_Q\}$, энергии и вероятности радиационных переходов, …**


★ A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, *et al*. HEDP **13**, 20 (2014);
A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.L. Falkov. HEDP **20**, 38 (2016).
A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.L. Falkov. HEDP **30**, 29 (2019).

* D.A. Liberman. PRB **20**, 4981 – 4989 (1979).
† R. Piron, T. Blenski. HEDP **7**, 346 – 352 (2011).
‡ R. Piron, T. Blenski. PRE **83**, 026403 (2011).
¶ C. E. Starrett, D. Saumon. PRE **87**, 013104 (2013).

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

## RESEOS: модель Старретта и Саумона

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

### Ионная подзадача

(уравнение Орнштейна-Цернике)

$$g(r) \equiv 1 + h(r)$$

$$h(q) = C(q) + n_i h(q) C(q)$$

$$1 + h(r) = \exp\left(-\beta V_{II}(r) + h(r) - C(r)\right)$$

$$\left(V_{II} - \text{парный межионный потенциал}\right)$$

$$V_{II}(q) = \frac{4\pi Z_0^2}{q^2} - T n_e^{scr}(q) C_{Ie}(q)$$

### Электронная подзадача

**Полная система зарядов**

$$\nabla^2 V_{el}(r) = 4\pi\left(n_e(r) - n_e^0 g(r) - Z\delta(\mathbf{r})\right)$$

**Система зарядов без центрального ядра**

$$\nabla^2 V_{el}^{ext}(r) = 4\pi\left(n_e^{ext}(r) - n_e^0 g(r)\right)$$

**Псевдоатом**

$$n_e^{PA}(r) = n_e(r) - n_e^{ext}(r)$$

Плотность электронов, экранирующих ион = плотность свободных электронов псевдоатома $n_e^{scr}(r) = n_e^{PA}(r) - n_{e,b}(r)$

$$n_e^{scr}(q)$$

$$C_{Ie}(q)$$

$$V_{Ie}(r) = -T n_i \int \left( C_{Ie}(r) - \frac{n_e^0}{T n_i r} \right) h\left(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|\right) d\mathbf{r}_1$$

C.E. Starrett, D. Saumon. PRE **93**, 063206 (2016).

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

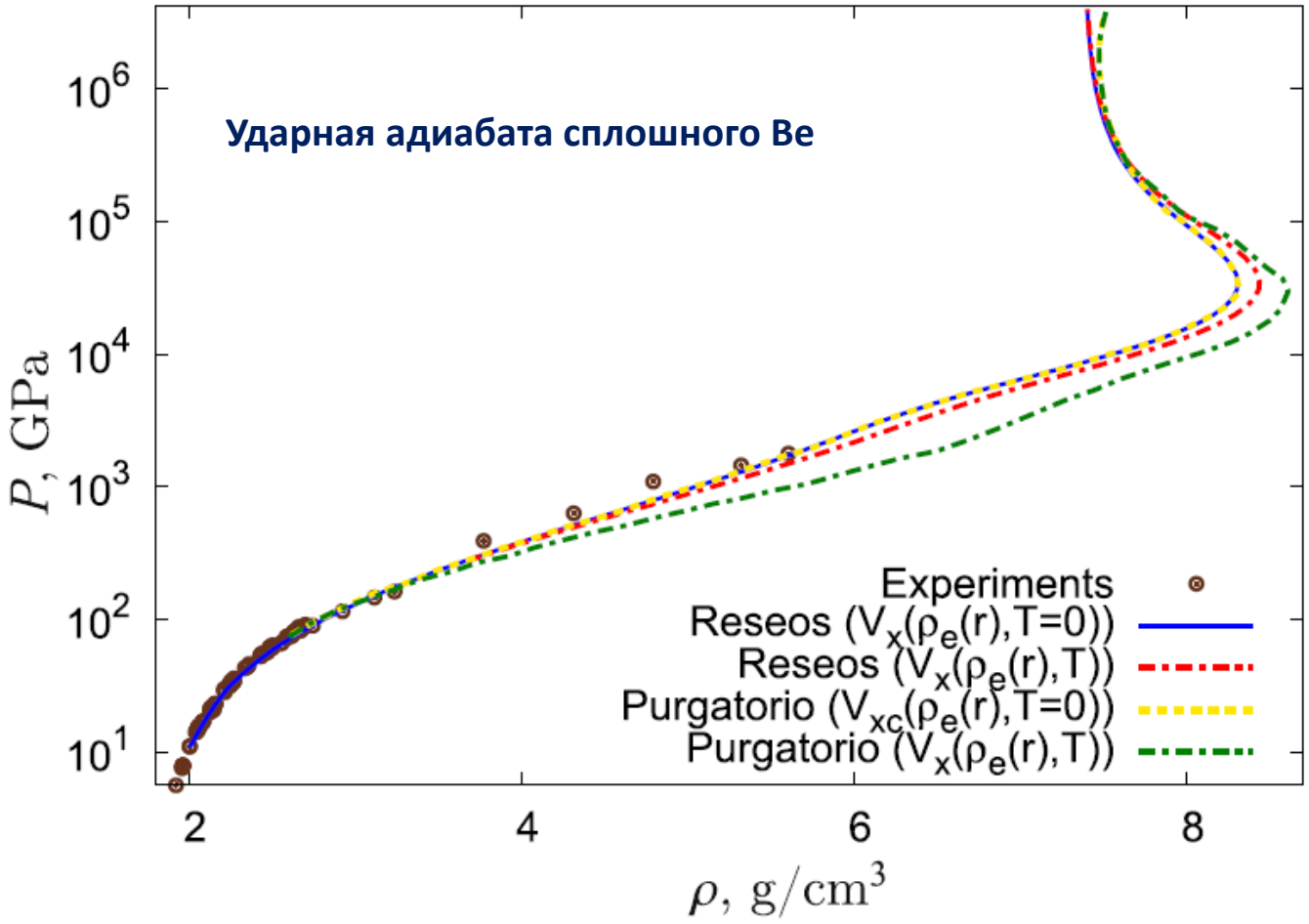
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

## CP-SC и RESEOS:

- **гладкие зависимости теплофизических характеристик от ρ и T:**
  - **U(ρ,T) (CP-SC);**
  - **учёт резонансов электронной плотности при ионизации давлением (RESEOS);**
- **термодинамически согласованные значения электронных компонент *p* и *E* (RESEOS: интегрирование $S_e(T)$ по *T*;**
- **моделирование сложных спектров д-д и д-н переходов с помощью SC подхода (RESEOS: предложен и реализован обобщённый вариант => существенное упрощение расчёта сложных спектров линейчатого поглощения/излучения).**

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

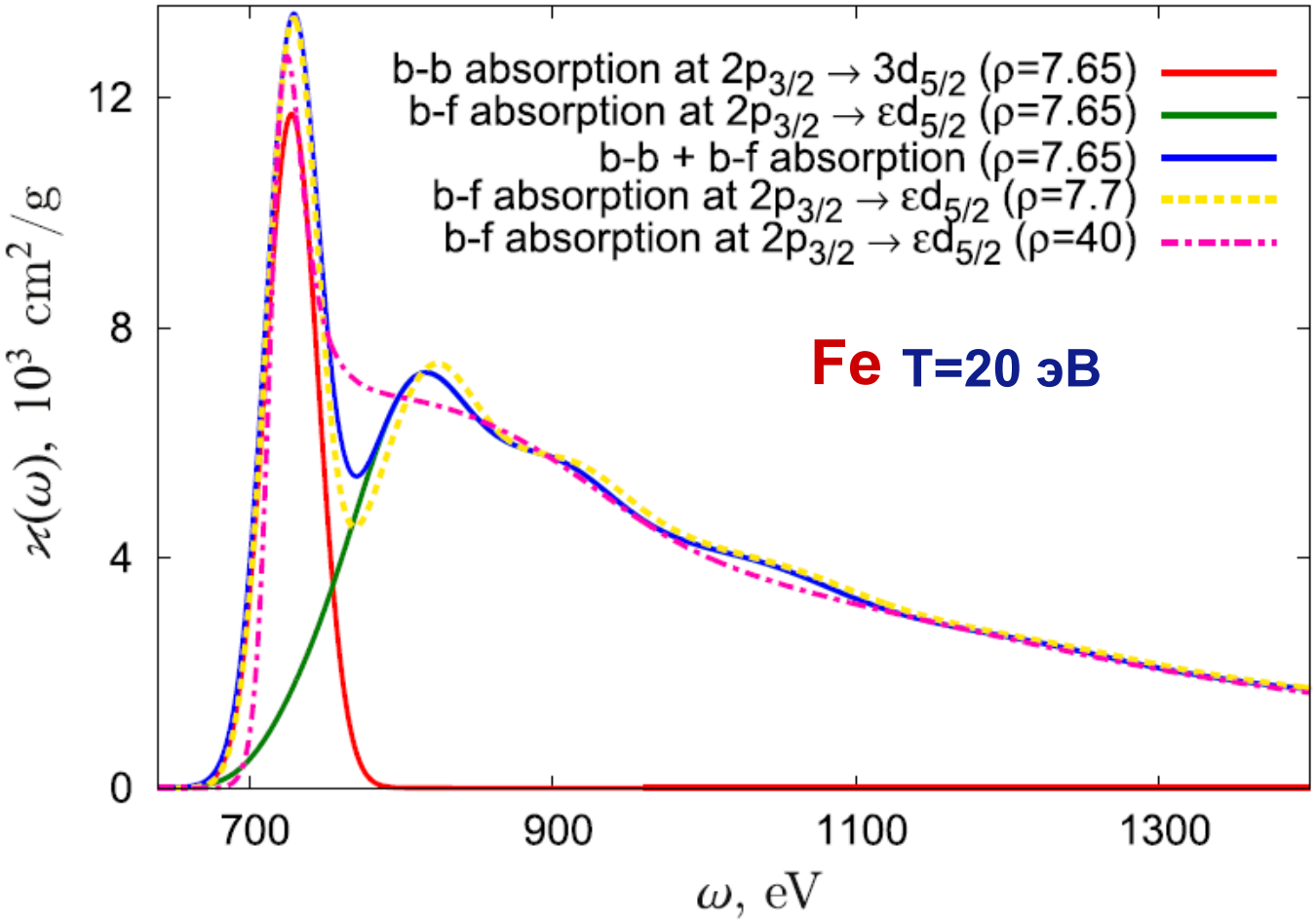



Экспериментальные данные: http://www.ihed.ras.ru/rusbank
Purgatorio: B. Wilson, V. Sonnad, P. Sterne, W. Isaacs. JQSRT **99** 658–679 (2006)

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

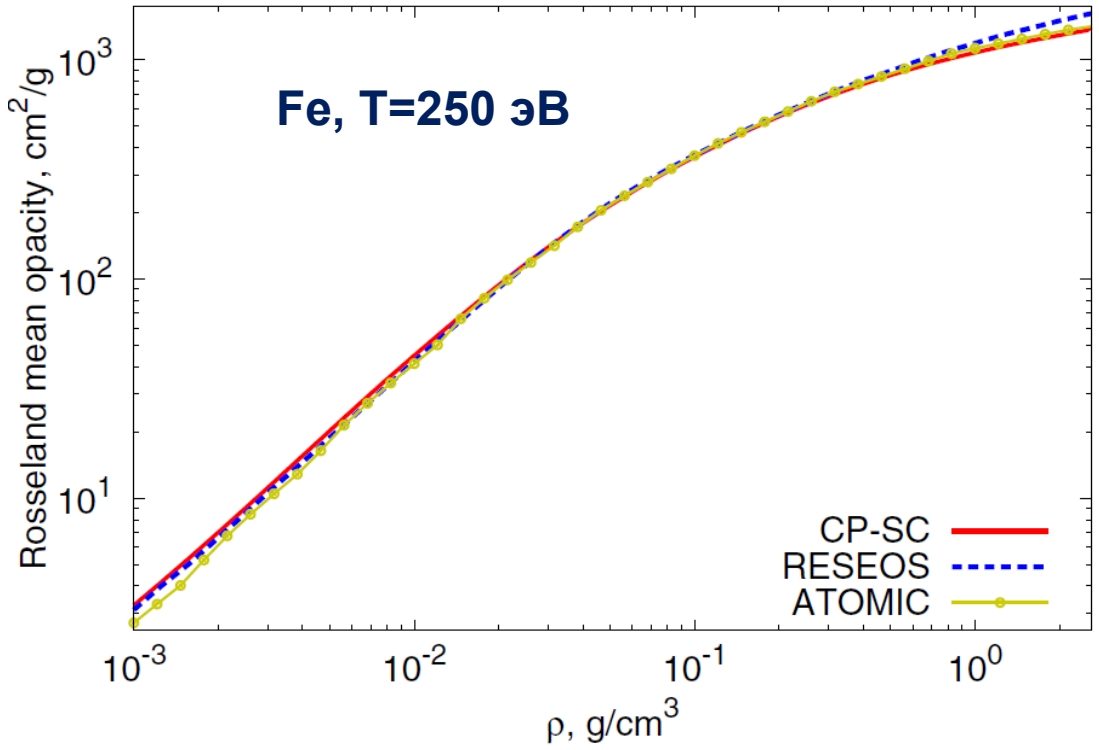
RESEOS: непрозрачности плавно изменяются при ионизации давлением, если сечения линейчатого поглощения и фотоионизации вычисляются в одинаковом приближении (здесь — эффективный учёт флуктуаций чисел заполнения)



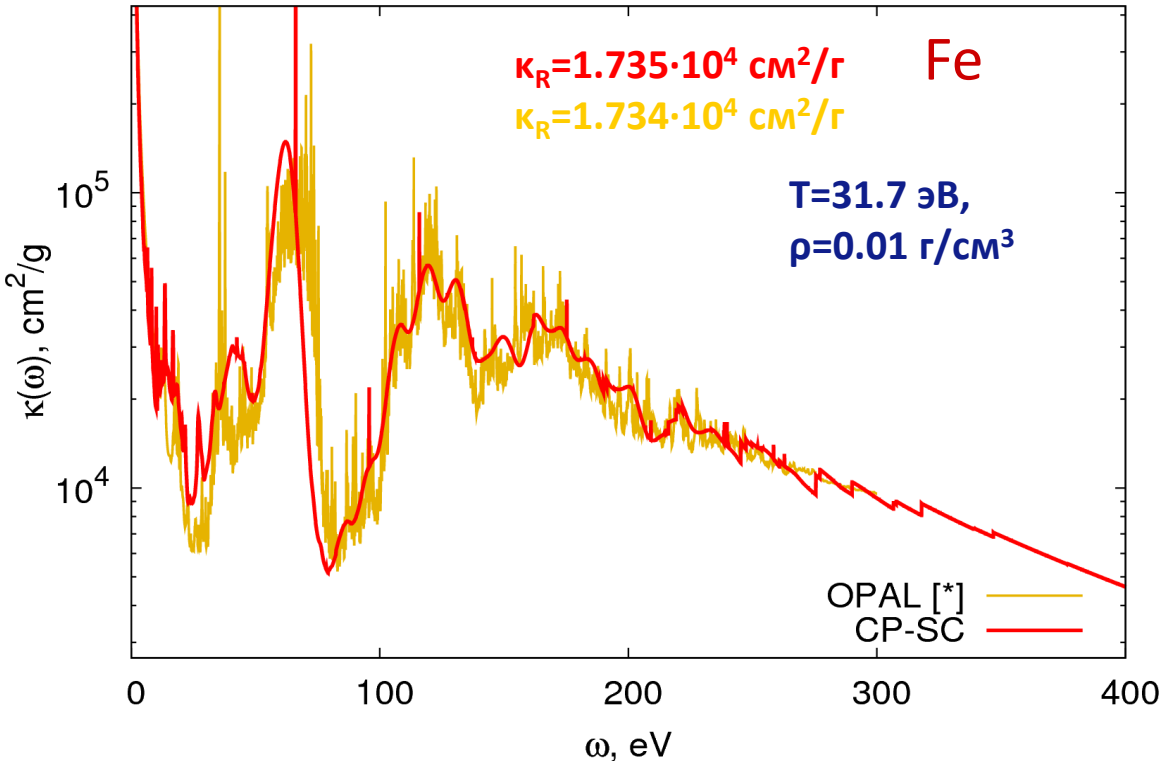
# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

RESEOS и CP-SC: росселандовы непрозрачности




CP-SC и OPAL: спектральные непрозрачности



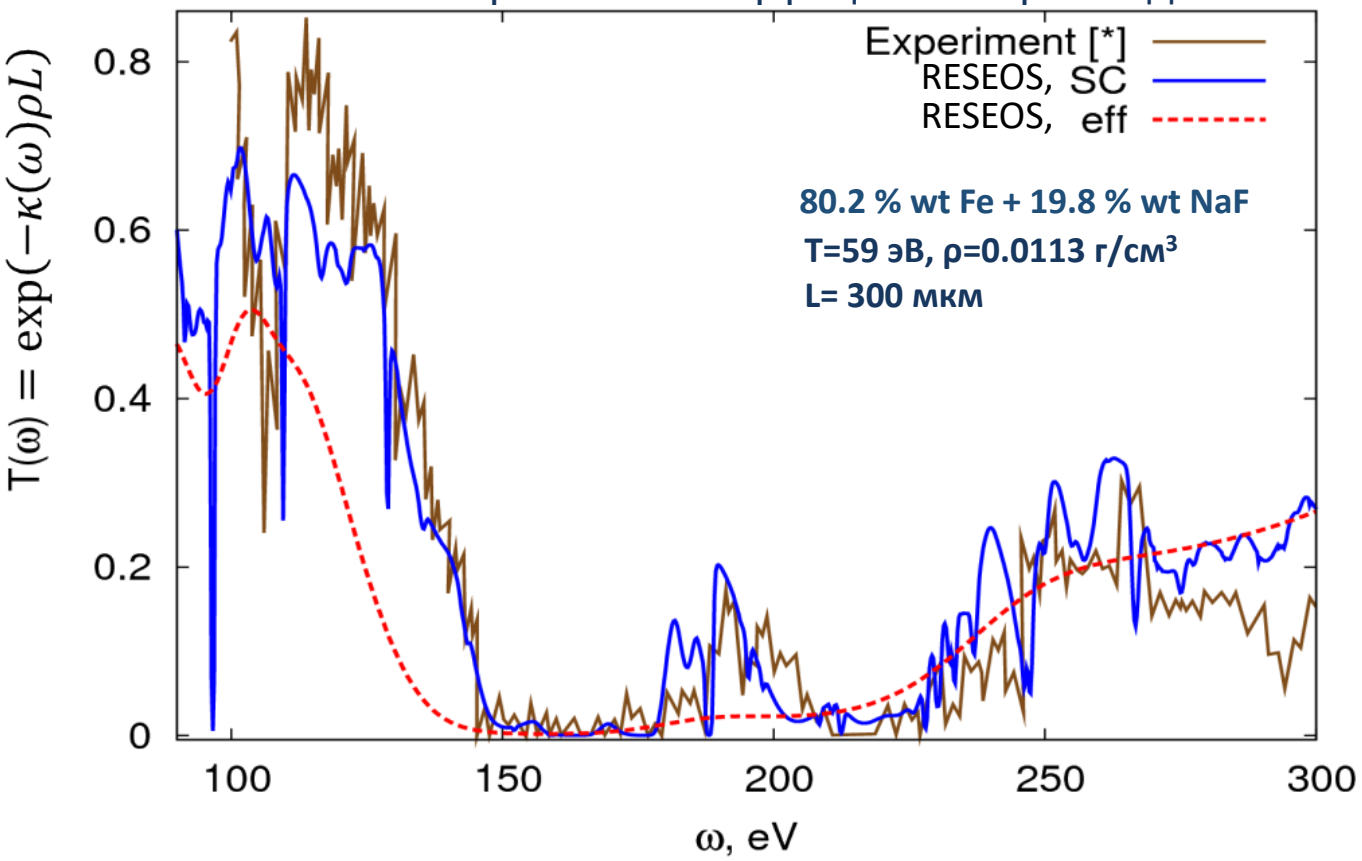

A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, V.V. Popova, et al. PRE **108**, 015207 (2023)

* C.A. Iglesias, F.J. Rogers. APJ, **464**, 943 – 953 (1996)

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

RESEOS: спектральные коэффициенты прохождения




Эксперимент:

* P.T. Springer, D.F. Fields, B.G. Wilson *et al.* PRL **69**, 3735 (1992);
P.T. Springer, D.F. Fields, B.G. Wilson *et al.* JQSRT **52**, 371 (1994).

**Существенное уточнение групповых росселандовых непрозрачностей (100 < ω < 300 эВ):**

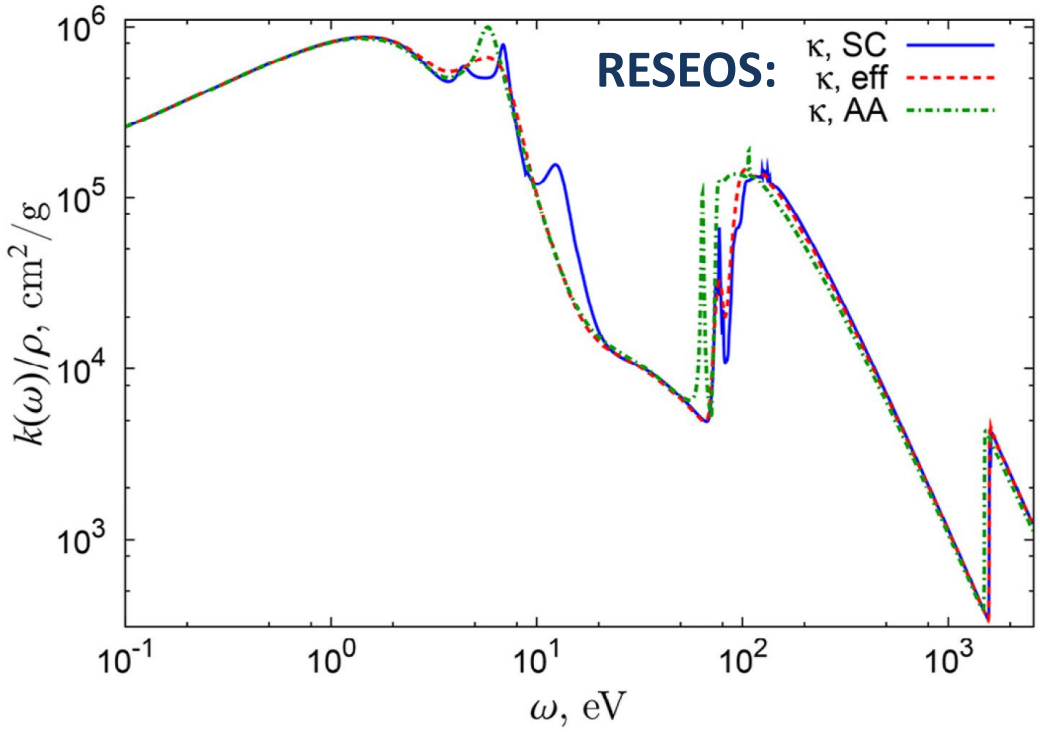
| Было, $\kappa'_R$(eff), см²/г | Стало, $\kappa'_R$(SC), см²/г | $\kappa'_R$(exp), см²/г |
|---|---|---|
| 6358 | **4822** | 4400 ± 600 |

**Очень важно для описания выхода рентгеновского излучения!**

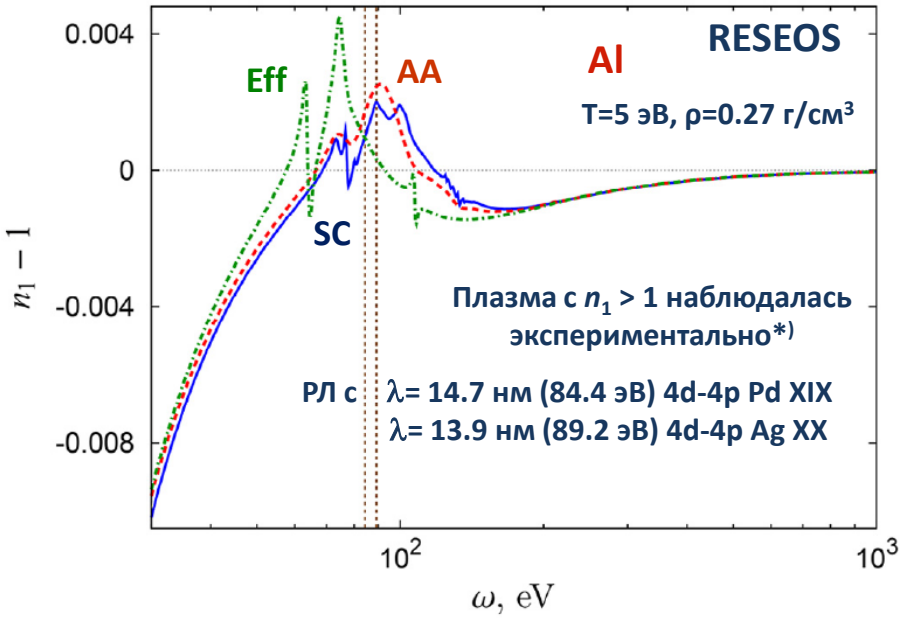
# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Непрозрачность Al с $\rho$ = 0.27 г/см$^3$, $T$ = 5 эВ с учётом рефракции.




$$k(\omega) = k'(\omega)/n_1(\omega), \quad n(\omega) = n_1(\omega) + in_2(\omega)$$
$$+$$
$$\varepsilon(\omega) = 1 + 4\pi i\sigma(\omega)/\omega, \quad k(\omega) = 2\omega n_2(\omega)/c$$
$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$$
$$\Downarrow$$
$$\sigma_1(\omega) = ck'(\omega)/4\pi = c\kappa(\omega)\rho/4\pi,$$
$$\kappa(\omega) - \text{непрозрачность при } (\rho, T) \text{ [см}^2\text{/г]}$$
$$\Downarrow$$
$$\sigma_2(\omega), \ \varepsilon(\omega)$$
$$\Downarrow$$
$$n(\omega)$$



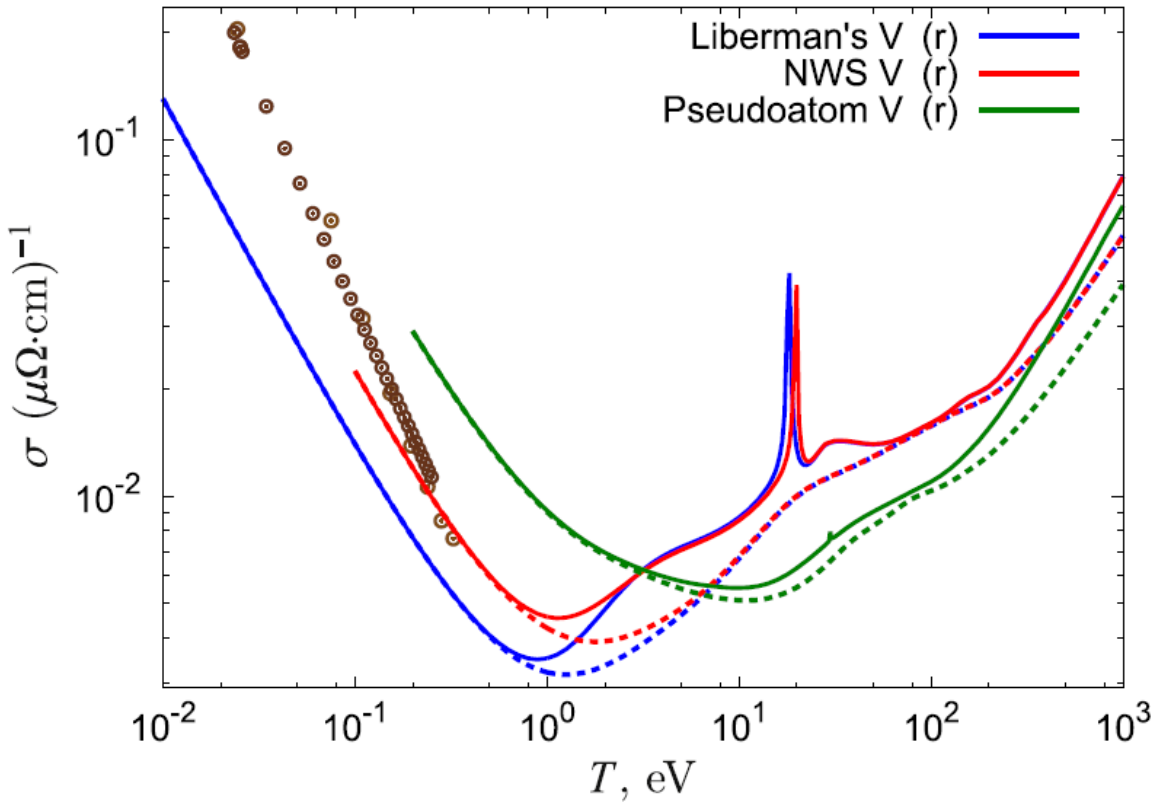


A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.L. Falkov. HEDP **20**, 38 (2016).
*) H. Tang et al. Appl. Phys. B: Lasers Opt. **78**, 975 (2004).
J. Nilsen *et al*. JQSRT **99**, 425 (2006).

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

RESEOS: изохоры проводимости W при ρ = 19.3 г/см$^3$




Сплошные линии: метод времени релаксации, штриховые — обобщённая формула Займана.

**Потенциал среднего атома без учёта ионных корреляций — короткодействующий**
**+**
**особенности поведения сечения рассеяния $\sigma_{ei}(\varepsilon)$ при малых $\varepsilon$.**

**Нефизичные пики при $T_e$ = 18 – 20 эВ.**

**Надлежащий учёт $ii$-корреляций с потенциалом псевдоатома — модель Старрета-Саумона — практически устраняет эти особенности.**

A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.L. Falkov. HEDP **20**, 38 (2016).


Справочник «*Таблицы физических величин*» под ред. И.К. Кикоина . М.: Атомиздат (1976).
Справочник «*Физические величины*» под ред. И. Григорьева и Е. Мелихова. М.: Атомиздат (1991).

# Псевдоатомная молекулярная динамика (ПАМД)

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Модель Старретта и Саумона, $V_{II}(r)$

Классическая молекулярная динамика с потенциалами $V_{II}(r)$, комплекс «Молох»*

Конфигурации ядер $\{\mathbf{R}_i\}$ для различных моментов времени

Приближение суперпозиции для электронной плотности

$$n_e(\mathbf{r}) = \sum_i n_e^{PA}\left(\left|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i\right|\right)$$

**<u>Для каждой конфигурации:</u>**

- Энергия $E = 3/2 \cdot NT + E_{e,K} + E_{el} + E_{xc}$
- Давление по релятивистской теореме вириала

$$3PV = NT + \left\langle -ic\left(\boldsymbol{\alpha}\nabla\right)\right\rangle + E_{el} +$$

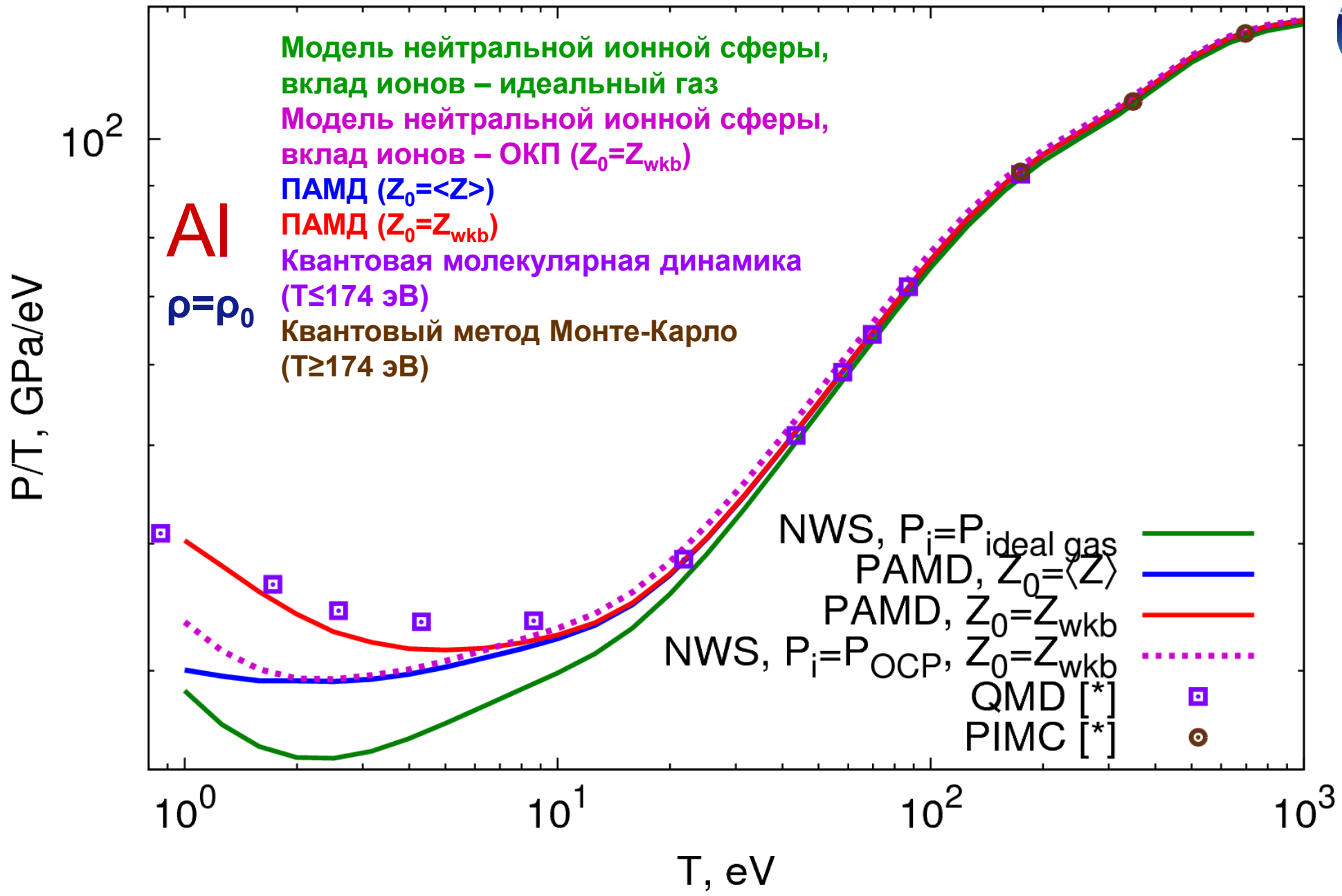
$$+3\left(-F_{xc} + \int_V d\mathbf{r} n_e(\mathbf{r}) \frac{\delta F_{xc}}{\delta n_e(\mathbf{r})}\right)$$

Усреднение по конфигурациям

Уравнение состояния

* F.A. Sapozhnikov, V.V. Dremov, G.V. Ionov, I.V. Derbenev, and N. E. Chizhkova, EPJ Web Conf. **10,** 00017 (2010).

# Давление для алюминия




РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

* K.P. Driver, F. Soubiran, B. Militzer. PRE **97**, 063207 (2018).

# Квазиклассическая версия ПАМД

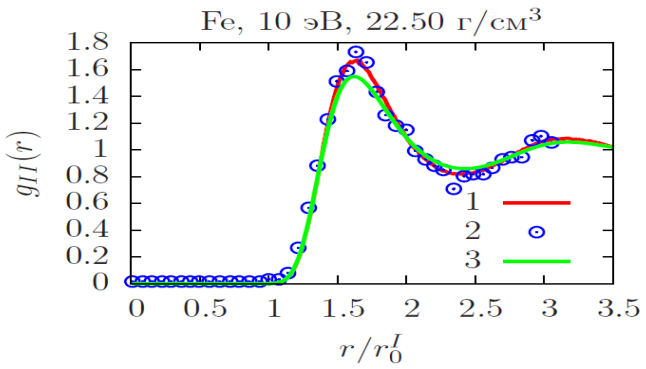
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

## Псевдоатомная МД: классическая МД + $V_{ii}(r)$ из модели ТФД$^+$ с учётом i-i корреляций (модель Старретта-Саумона)

А.Л. Фальков, П.А. Лобода, А.А. Овечкин, С.В. Ивлиев. ЖЭТФ **161**, 438–452 (2022).

### Ионные структурные и переносные характеристики

- Парные корреляционные функции ионов и структурные факторы в расплавах и плотной плазме;
- расчёты коэффициентов вязкости и диффузии ионов в широком диапазоне T и ρ;
- расчёты коэффициента поверхностного натяжения плазмы и расплава;
- простые вещества и многокомпонентные смеси;
- точность на уровне безорбитальной КМД при более высокой экономичности.



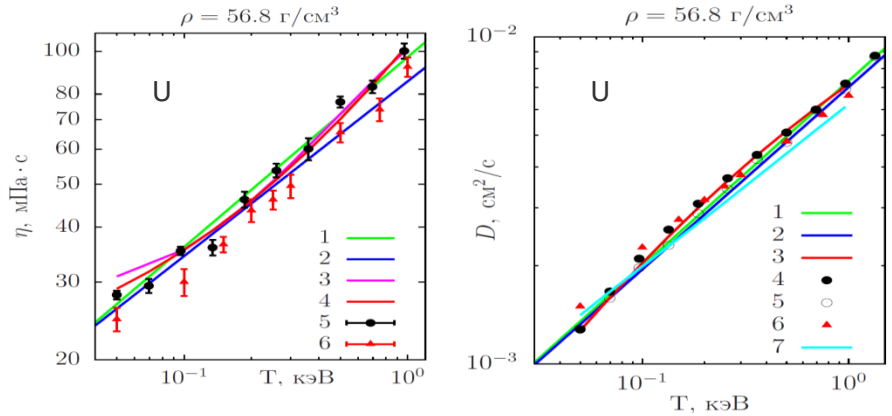

**Бестигельная зонная плавка: аффинаж – *D***
**Размер «капли» – σ.**

Приближение Кирквуда: $$\sigma = \frac{\pi}{8}\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int_0^\infty \frac{dV_{ii}(r)}{dr} g_{ii}(r) r^4 dr$$

Коэффициенты поверхностного натяжения σ расплавов при атмосферном давлении, мДж/м$^2$

| Элемент | T пл., K | Эксперимент† | Расчёт | Расчёт* |
|---|---|---|---|---|
| Al | 932 | 912 | 915 | 1150 |
| Ca | 1123 | 346 | 342 | |
| Fe | 1809 | 1856 (1800) | 1807 | 1700 |

Коэффициенты ионной вязкости и диффузии: прибл. Эйнштейна-Смолуховского и Кубо-Грина.




† Г.Н. Еланский, Д.Г. Еланский. *Строение и свойства металлических расплавов*. М.: Юрайт (2022).
* «Универсальная» (для произвольных элементов) модель: $V_{ii}(r)$ по ББГКИ.
В.А. Полухин, Н.А. Ватолин. *Моделирование аморфных металлов*. М.: Наука (1985).

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

# RESEOS: ПАМД

**Анализ результатов прямого моделирования ТД характеристик плотного ионизованного вещества методом ПАМД для построения широкодиапазоннных УРС с учётом эффектов неидеальности ионной компоненты.**

↓

**основные закономерности поведения ионных компонент ТД величин с изменением ρ и T**

↓

**новое *простое* неэмпирическое приближение для расчёта вклада ионов в УРС на основе моделей среднего атома.**

**Использование нового приближения для вклада ионов вместо приближений идеального газа или однокомпонентной плазмы заметно повышает точность расчётов по современным моделям среднего атома.**

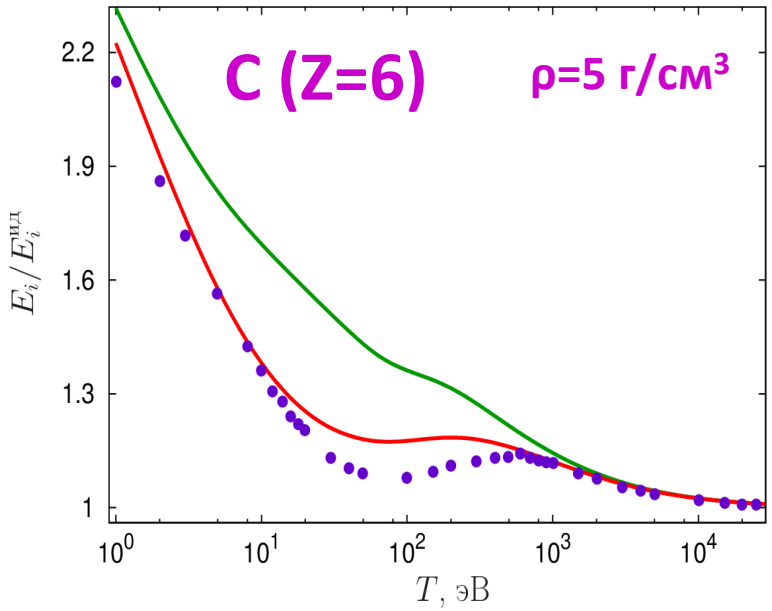
A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.L. Falkov, P. A. Sapozhnikov. Phys. Rev. E **103**, 053206 (2021).
A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, P. A. Sapozhnikov. Phys. Rev. E **111**, 045204 (2025).

# Поправки к ионной внутренней энергии. Сравнение с безорбитальной МД

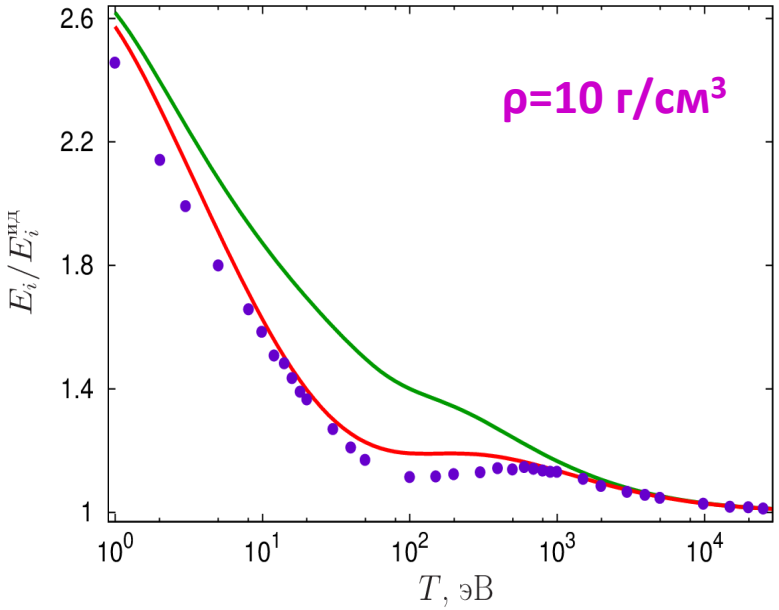
РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

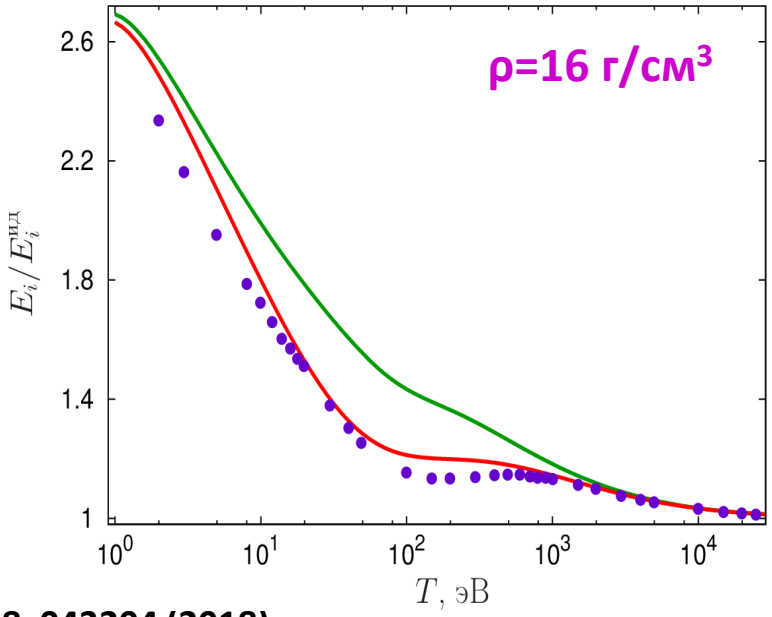
$$\Delta E_i = \Delta E_i^{\text{окп}} \left\{ 1 - \frac{1}{\left[1 + p_1\,\gamma^{p_2}\right]\left[1 + p_3\,\theta^{p_4}\,(a_B/\lambda)^{p_5}\right]} \right\} \quad (*)$$

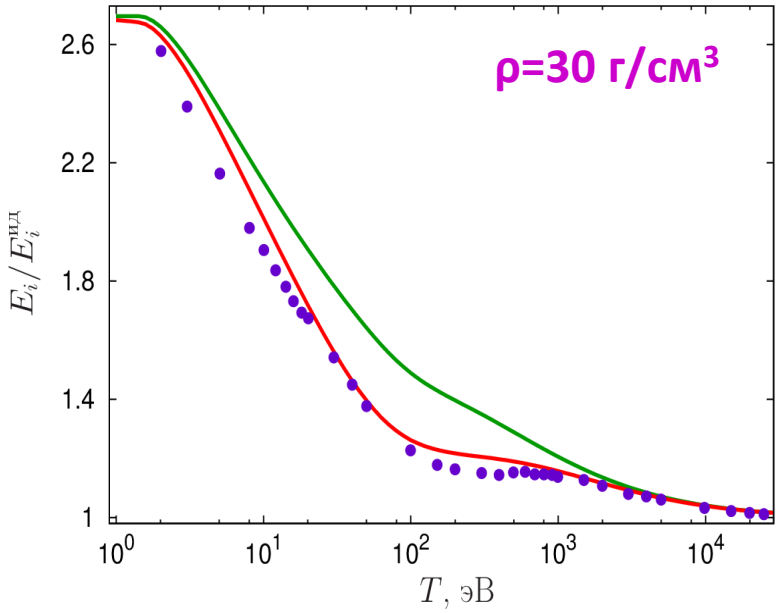
**Приближение ОКП согласуется с безорбитальной МД при высоких и низких T, а при промежуточных T систематически завышает $E_i$**




**Новое приближение (*)**
**Безорбитальная МД [1]**
**ОКП**



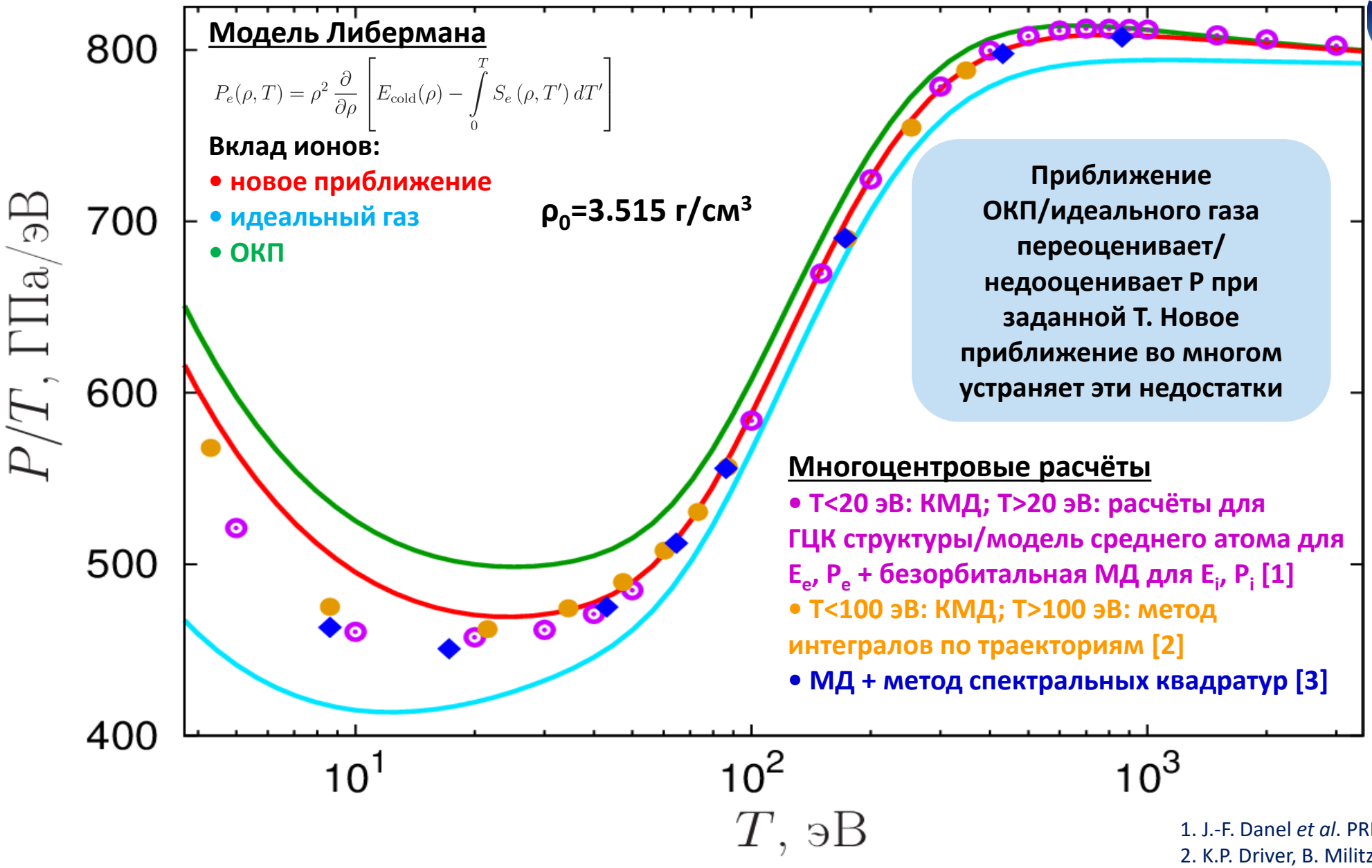




1. J.-F. Danel, L. Kazandjian, R. Piron. Phys. Rev. E 98, 043204 (2018).

# Ударная адиабата алмаза

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ





1. J.-F. Danel *et al*. PRE **98**, 043204 (2018)
2. K.P. Driver, B. Militzer. PRL. **108**, 115502 (2012)
3. M. Bethkenhagen *et al*. PRE **107**, 015306 (2023)

# Модели плотного ионизованного вещества и согласованного описания его теплофизических свойств

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

## Радиационно-столкновительная модель среднего атома в RESEOS

**Задача: описание ионизационного состояния и сложных спектров излучения / поглощения *одновременно* с динамикой горячей *неравновесной* плазмы**

**Уравнения для средних чисел заполнения электронных оболочек: учитываются все одно- и двух-электронные атомные процессы**

$$\frac{dN_m}{dt} = -N_m L_m + (g_m - N_m) S_m$$

Автоионизация ($2e^-$)

$$L_m = \sum_k \left(w_{mk}^{(c)} + w_{mk}^{(r)}\right)\left(1 - \frac{N_k}{g_k}\right) + w_{mc}^{(c)} + w_{mc}^{(r)} + A_m$$

д.-д. процессы  д.-н. процессы

Диэл. захват ($2e^-$)

$$S_m = \frac{1}{g_m}\sum_k \left(w_{km}^{(c)} + w_{km}^{(r)}\right) N_k + w_{cm}^{(c)} + w_{cm}^{(r)} + D_m$$

**Атомные данные**

**Средний атом в ЛТР**

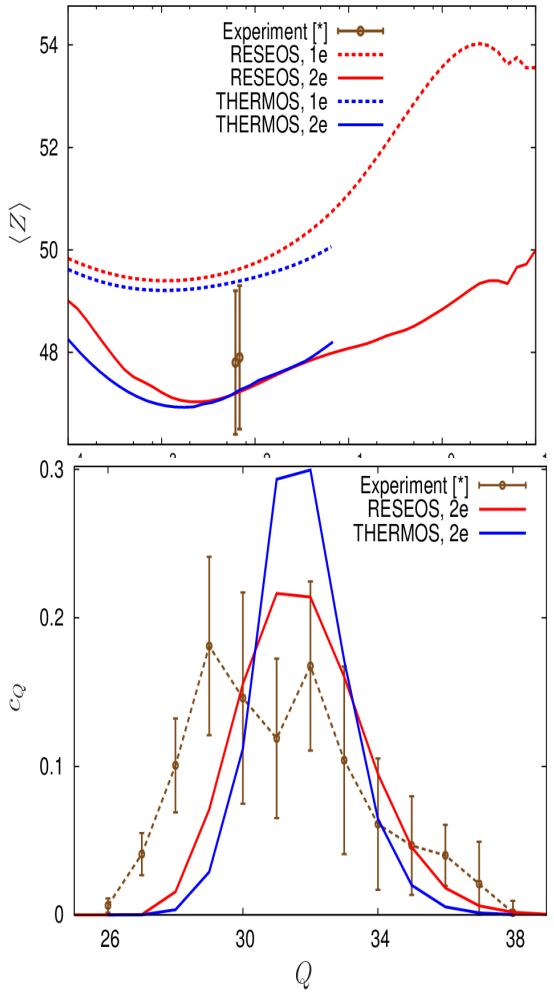
**Изолированные ионы**

**Неравновесные $\varepsilon_m$ – по ТВ**

**Резкое уменьшение времени счёта!**

A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.S. Korolev *et al*. Matter Radiat. Extremes **7**, 064401 (2022)

**Средние заряды ионов и ионный состав неравновесной плазмы золота**




*** R.F. Heeter et al. PRL 99, 195001 (2007)**

# Рентгеновская спектроскопия плазмы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

**Модели расчёта локальных спектров линейчатого излучения и усиления/поглощения многоэлектронных ионов в плазме:**

- **применение метода атомной матрицы плотности, учёт нелинейных интерференционных эффектов;**
- **учёт основных механизмов уширения в плазме: статистического штарковского, электронно-столкновительного, радиационного и доплеровского;**
- **любые связанно-связанные переходы;**
- **совместный учёт влияния квазистатического ионного микрополя и резонансного поля излучения на процессы заселения ионных состояний и насыщения спектра усиления;**
- **учёт эффектов ионной динамики при описании ионного штарковского уширения по модели частотных флуктуаций ионного микрополя (FFM) в контексте формализма матрицы плотности.**


P.A. Loboda, V.A. Lykov, V.V. Popova. Proc. SPIE **1928**, 145 (1993).
P.A. Loboda *et al.* J. Appl. Phys. **57**, 325 (1993).
P.A. Loboda, V.A. Lykov, V.V. Popova. Proc. SPIE **2012**, 232 (1994).
P.A. Loboda *et al.* Proc. 5th Intl. Conf. X-ray lasers, IOP Conf. Ser. **151**: **Sec. 9**, 318 (1996).
P.A. Loboda, V.V. Popova, M.K. Shinkarev. JQSRT **58**, 757 (1997).
P.A. Loboda *et al*. LPB **18**, 275 (2000).
А.Ю. Летунов, В.С. Лисица, П.А. Лобода, А.А. Новиков. ЯФ и инжиниринг **15**, 332 (2024)
А.Ю. Летунов, В.С. Лисица, П.А. Лобода, А.А. Новиков. Письма в ЖЭТФ, **120**, 118 (2024)

# Рентгеновская спектроскопия плазмы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

**Проблема ионной динамики — задача учёта влияния теплового движения ионов на штарковское уширение спектральных линий.**

**Модель частотных флуктуаций ионного микрополя плазмы (Frequency-Fluctuation Model — FFM)**

**FFM: стохастическое изменение плазменного микрополя => перераспределение интенсивности между отдельными спектральными участками профиля линии.**

**Основной параметр — частота скачков ионного микрополя:** $\nu = k\upsilon_{T_i} N_i^{1/3} = k\nu_0$

$$\nu_0 \simeq \upsilon_{T_i} \Big/ r_0 \simeq T_{F_0}^{-1},\ F_0 \approx \left\langle Z_i^{3/2} \right\rangle^{2/3} \Big/ r_0^2$$

$k \neq 1 \Rightarrow \nu = \left\langle 1/T(F,\mathrm{v}) \right\rangle_{F,\mathrm{v}}$ **— обратное время жизни значения микрополя *F*. *k* = ?**

**Стохастическая модель расчета распределения напряженности поля С. Чандрасекара и Д. фон Неймана для описания распределения гравитационного поля $F_g$ в звёздных скоплениях: силовое поле стохастически изменяется с частотой $\nu_{ЧН}$. Изменения величины поля — марковский процесс. Определение** $T(\mathbf{F}_g, \mathbf{v})$**.**

$$M_i \to Z_i,\ G \to 1 \Rightarrow F_g \to F,\ \ \nu = \left\langle 1/T\left(|\mathbf{F}|, |\mathbf{v}|\right) \right\rangle_{|\mathbf{F}|,|\mathbf{v}|}$$


А.Ю. Летунов, В.С. Лисица, П.А. Лобода, А.А. Новиков. ЯФ и инжиниринг **15**, 332 (2024)
А.Ю. Летунов, В.С. Лисица, П.А. Лобода, А.А. Новиков. Письма в ЖЭТФ, **120**, 118 (2024)

# Рентгеновская спектроскопия плазмы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

**FFM*):**

$$I_i(\omega) = \frac{\nu}{\pi}\frac{J_0(\omega)\,J_2(\omega) - J_1^2(\omega)}{J_2^2(\omega) + \nu^2 J_1^2(\omega)},$$

$$J_k(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_{i0}(\omega')\,(\omega-\omega')^k}{\nu^2 + (\omega-\omega')^2} d\omega'.$$

$I_{i0}(\omega)$ **— нужен ионный квазистатический профиль *без учёта* других механизмов уширения**

**?**

*) Л.А. Буреева, М.Б. Кадомцев, М.Г. Левашова, В.С. Лисица, А. Калисти, Б. Талин, Ф.Б. Розми, Письма в ЖЭТФ **90**, 718 (2009).

# Рентгеновская спектроскопия плазмы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

## Модель LineDM

$$\rho = \rho^0 + \rho^\mu,$$

$$[\partial/\partial t + \boldsymbol{v}_i \nabla]\rho^0 = -\frac{i}{\hbar}[H + V_F, \rho^0] + R\rho^0 + Q,$$

$$[\partial/\partial t + \boldsymbol{v}_i \nabla]\rho^\mu = -\frac{i}{\hbar}[H + V_F, \rho^\mu] + R\rho^\mu - \frac{i}{\hbar}[V_\mu, \rho^0].$$

$$\rho^\mu_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_q C^{\mu^*}_q \rho^q_{\alpha\beta}(\omega)\delta_{q, M_\alpha - M_\beta}, \ \alpha \in \{\alpha\}, \beta \in \{\beta\},$$

$$G(\omega) = \frac{4\pi\omega}{3c} \cdot \mathrm{Re}\left\langle i \sum_{\alpha\beta} (d_q)^*_{\alpha\beta} \rho^q_{\alpha\beta}(\omega) \right\rangle_{v_i, F},$$

$$I(\omega) = -\frac{4\omega^4}{3\pi c^3} \cdot \mathrm{Re}\left\langle \sum_{\alpha\beta, q} (d_q)^*_{\alpha\beta} \rho^q_{\alpha\beta}(\omega) \right\rangle_{v_i, F}$$

## Модель LineDM + FFM

$$I^{(DM)}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} I_{i0}(\omega - \omega')V(\omega')d\omega',$$

$$I_k(\omega) = \frac{1}{\pi} Re\left\{ \int_0^\infty e^{-i\omega\tau}\Phi_k(\tau)d\tau \right\},$$

$$\Phi_k(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega\tau} I_k(\omega)d\omega.$$

$$\Phi^{(DM)}(\tau) = \Phi_{i0}(\tau) \cdot \Phi_V(\tau),$$

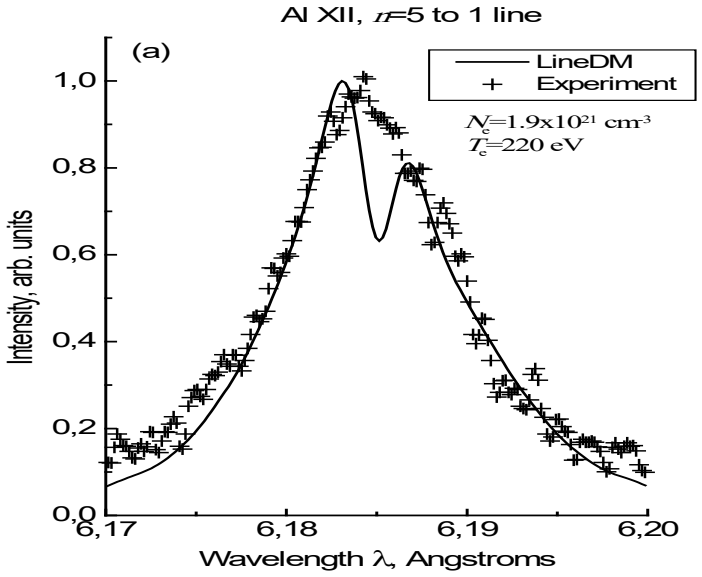
$$I_{i0}(\omega) = \frac{1}{\pi} Re\left\{ \int_0^\infty e^{-i\omega\tau} \frac{\Phi^{(DM)}(\tau)}{\Phi_V(\tau)} d\tau \right\}.$$

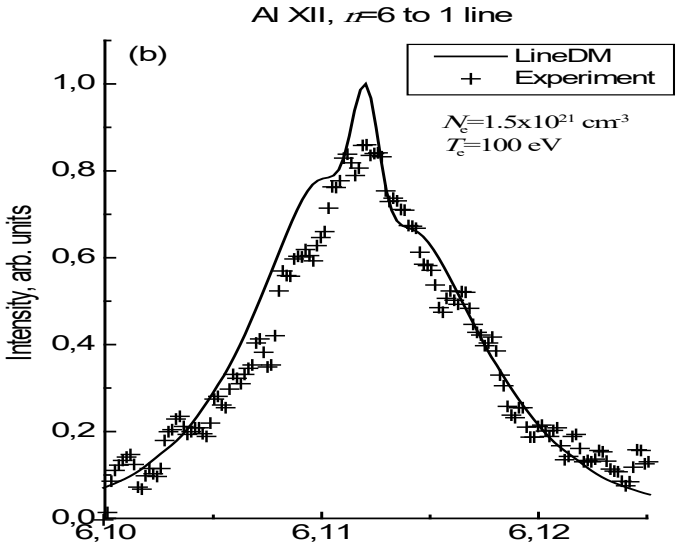

P.A. Loboda *et al*. LPB **18**, 275 (2000).
А.Ю. Летунов, В.С. Лисица, П.А. Лобода, А.А. Новиков. ЯФ и инжиниринг **15**, 332 (2024)
А.Ю. Летунов, В.С. Лисица, П.А. Лобода, А.А. Новиков. Письма в ЖЭТФ, **120**, 118 (2024)

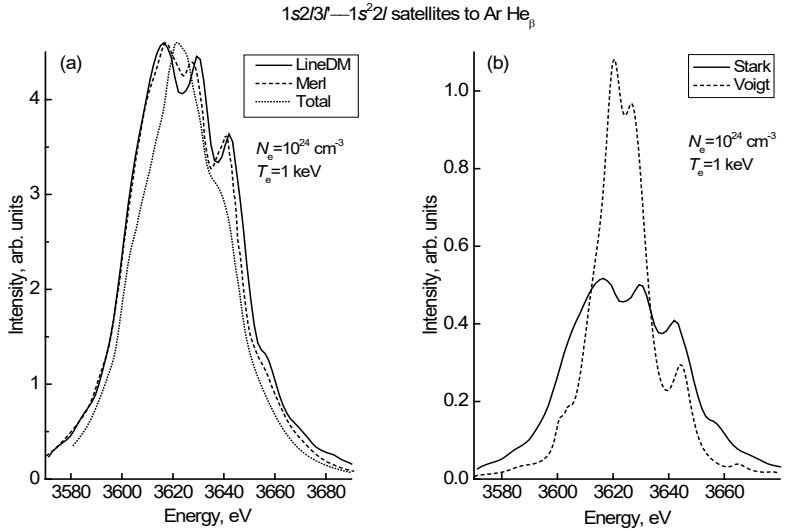
# Рентгеновская спектроскопия плазмы

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

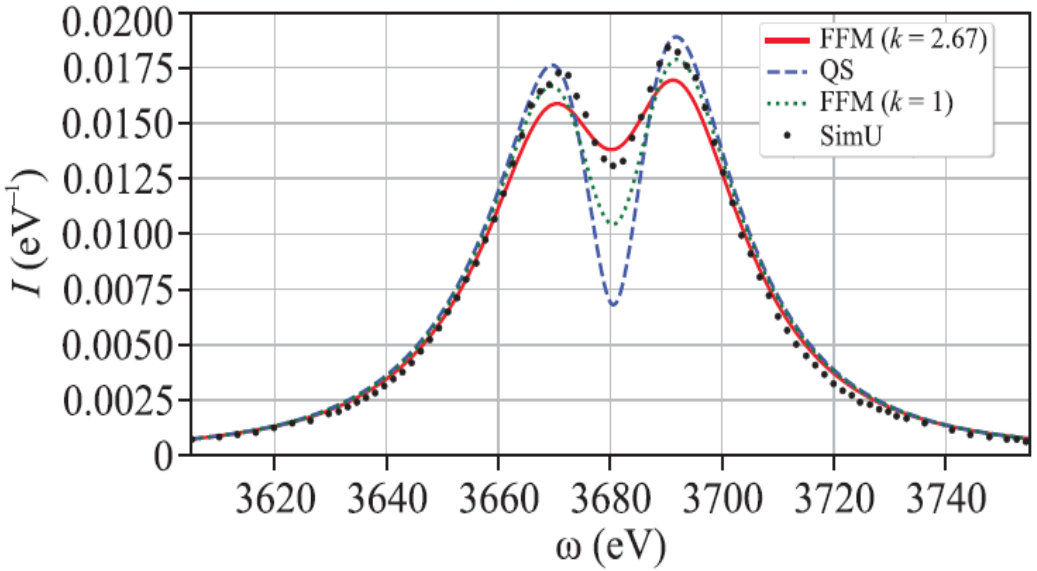
**Спектры плазмы Al, созданной XeCl лазером вблизи поверхности мишени. Разлёт в вакуум.**




**Профиль линии $He_\beta$ ArXVII, $N_e = 2 \cdot 10^{24}$ см$^{-3}$, T = 1 кэВ. Излучение примеси аргона с концентрацией 0.1 % в D-плазме. Сравнение с результатами расчетов методом МД (SimU)**



# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

**Созданы новые и значительно усовершенствованы ранее разработанные модели расчёта теплофизических характеристик плотного ионизованного вещества произвольного химического состава, описания характеристик неравновесной высокотемпературной плазмы и детальных линейчатых спектров излучения многоэлектронных ионов для решения задач рентгеновской диагностики плазмы.**

**Применение новых систем широкодиапазонных данных, построенных с помощью этих моделей, существенно расширило возможности физико-математического моделирования различных процессов и явлений, возникающих при высоких плотностях энергии.**

РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

# СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!