Расчёты непрозрачностей по модели Либермана

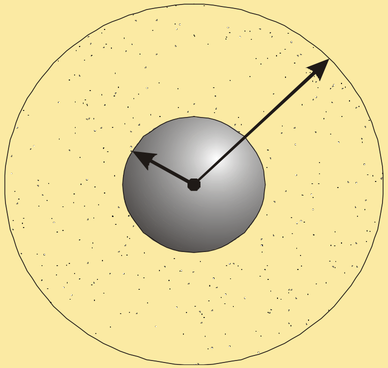
А.С. Грушин[1], П.А. Лобода[2], В.Г. Новиков[1], А.А. Овечкин[2], В.В. Попова[2], А.Д. Соломянная[1], А.А. Шадрин[2]

[1]*Институт Прикладной Математики им. М.В. Келдыша РАН*

[2]*Российский Федеральный Ядерный Центр Всероссийский Научно Исследовательский Институт Технической Физики им. акад. Е.И. Забабахина*

Научно-координационная сессия «Исследования неидеальной плазмы»
Москва, 2010

Модель самосогласованного поля



$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - V(r)\right)\Psi_\nu(\vec{r}) = \varepsilon_\nu \Psi_\nu(\vec{r})$$

или

$$-ic\left(\vec{\alpha}\nabla\right)\Psi_\nu(\vec{r}) = \left(\varepsilon_\nu + V(\vec{r}) - c^2(\beta - 1)\right)\Psi_\nu(\vec{r})$$

Приближение среднего атома

$$\frac{4}{3}\pi r_0^3 n = 1$$

$$N_\nu = \frac{1}{1 + \exp\dfrac{\varepsilon_\nu - \mu}{kT}}$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_\nu N_\nu \left|\Psi_\nu(\vec{r})\right|^2$$

$$\Delta V_c(\vec{r}) = 4\pi\rho(\vec{r})$$

Граничные условия для волновых функций в модели Либермана

при $r = 0$: $\quad R_{nl}(0) = 0, \quad R_{\varepsilon l}(0) = 0$

при $r \to \infty$: $\quad R_{nl}(r) \to 0, \quad R_{\varepsilon l}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi k}}\sin(kr + \varphi_0)$

Модель Либермана

Liberman D.A. Phys Rev B, 1979, v.20, p.4981-4989.

Применение модели Либермана для расчётов уравнений состояния и пробегов излучения

1. **INFERNO** (*D.A. Liberman, B.I. Bennett* – Лос-Аламос)

- *D.A. Liberman* // JQSRT, 1982, v.27, p.335-339.

2. **Purgatorio** (*B. G. Wilson, P.A. Sterne, V. Sonnad, W.A. Isaacs, S.B. Hansen, D.A. Young* – Ливермор)

- *B. Wilson, V. Sonnad, P. Sterne, W. Isaacs* // JQSRT, 2006, v.99, p.658-679.

3. **EOSTA** (*A. Bar-Shalom A., J. Oreg., M. Klapisch* – Негев, Израиль)

- *A. Bar-Shalom, J. Oreg, M. Klapisch* // JQSRT, 2006, v.99, p.35-54.

4. (*J.C. Pain, G. Dejonghe, T. Blenski* – Франция)

- *J.C. Pain, G. Dejonghe, T. Blenski* // JQSRT, 2006, v.99, p.451-468.

5. **Paradisio** (*M. Penicaud* – Франция)

- *M. Penicaud* // J. Phys.: Condens. Matter, 2009, v.21, p.1-8.

6. **RESEOS** (*В.Г. Новиков, А.А. Овечкин* – ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)

- *В.Г. Новиков, А.А. Овечкин* // Математическое моделирование, 2010.

Модели и программы, используемые в данной работе для сравнения с программой RESEOS

1. Модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера. Код **THERMOS** (А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров, В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная – ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).

2. Суперконфигурационная модель. Код **STA** (A. Bar-Shalom (Израиль), J.Oreg (США), W.H. Goldstein (США), D. Shvarts (Израиль), A. Zigler(Израиль), M. Klapisch (США)).

3. Суперконфигурационная модель на основе модели Либермана. Код **EOSTA** (A. Bar-Shalom (Израиль), J.Oreg (США), M. Klapisch (США)).

4. Химическая модель с использованием суперконфигурационного подхода. Код **Spectr-STA** (П.А. Лобода, Д.С. Нецветаев, В.В. Попова, Л.В. Самоловских, А.А. Шадрин – РФЯЦ ВНИИТФ им. акад. Е.И. Забабахина).

5. Модель Хартри-Фока-Слэтера с учётом зонной структуры спектра (квазизонная модель). Код **TH_BAND** (В.Г. Новиков, А.С. Грушин – ИПМ им. М.В. Келдыша РАН).

Процессы поглощения и рассеяния фотонов

1. **Поглощение в линиях** – переходы электронов между состояниями дискретного спектра

$$\sigma_{bb}(\omega) = \frac{3}{4}\pi\, c^3\, \sigma_0 \sum_{\alpha,\beta\,(l_\beta = l_\alpha \pm 1)} (2j_\alpha + 1)\, n_\alpha\, (1 - n_\beta)\, f_{\alpha\beta}\, J(\omega, \varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta)$$

2. **Фотоионизация** – переходы электронов из дискретного в непрерывный спектр

$$\sigma_{bf}(\omega) = \frac{3}{4}\pi\, c^3\, \sigma_0 \sum_{\alpha} \sum_{l = l_\alpha \pm 1,\, j} (2j_\alpha + 1)\, n_\alpha \int_{-V_\infty}^{\infty} d\varepsilon (1 - n(\varepsilon))\, f_{\alpha,\varepsilon l j}\, J(\omega, \varepsilon_\alpha, \varepsilon)$$

3. **Тормозное поглощение** – переходы электронов между состояниями непрерывного спектра

$$\sigma_{ff}(\omega) = \frac{3}{4}\pi\, c^3\, \sigma_0 \sum_{l j} \sum_{l' = l \pm 1,\, j'} (2j + 1) \int_{-V_\infty}^{\varepsilon_0} d\varepsilon \int_{-V_\infty}^{\infty} d\varepsilon'\, n(\varepsilon)\, (1 - n(\varepsilon'))\, f_{\varepsilon l j,\, \varepsilon' l' j'} \cdot$$

$$\cdot J(\omega, \varepsilon, \varepsilon') + \frac{16\pi\, Z_0^2}{3\sqrt{3}\, c\omega^3} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} d\varepsilon\, n(\varepsilon)\, (1 - n(\varepsilon + \omega))$$

4. **Комптоновское рассеяние** ($\sigma_s(\omega)$) . Интерполяция формулы Тамма-Клейна-Нишины (A.F. Nikiforov, V.G. Novikov, V.B. Uvarov // Quantum-statistical models of hot dense matter. Birkhauser, 2005, p.170).

Коэффициент поглощения с учётом рассеяния:

$$\varkappa(\omega) = \left(1 - e^{-\frac{\omega}{kT}}\right) \left(\sigma_{bb}(\omega) + \sigma_{bf}(\omega) + \sigma_{ff}(\omega)\right) + \sigma_s(\omega)$$

Эффективная методика учёта флуктуаций чисел заполнения одноэлектронных состояний в плотной высокотемпературной плазме

- *J. Stein, D. Shalitin, A. Ron //* Phys. Rev. A 31, 1985, p.446.
- *В.В. Драгалов, В.Г. Новиков //* ТВТ, 1987, т.25, вып.6, с. 1057.

одноэлектронный переход $\alpha \longrightarrow \beta$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{3}{4}\pi\, c^3\, \sigma_0\, f_{\alpha\beta}\, g_\alpha\, n_\alpha\, (1 - n_\beta)\, J_{\alpha\beta}(\omega)$$

$$J_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi\left(D^2_{\alpha\beta} + \Delta^2_{\alpha\beta}\right)}} K\left(\frac{\omega - \varepsilon_{\alpha\beta} - (\Delta\varepsilon)_{\alpha\beta}}{\sqrt{\pi\left(D^2_{\alpha\beta} + \Delta^2_{\alpha\beta}\right)}}, \frac{\gamma_{\alpha\beta}}{\sqrt{\pi\left(D^2_{\alpha\beta} + \Delta^2_{\alpha\beta}\right)}}\right)$$

$$(\Delta\varepsilon)_{\alpha\beta} = D_\alpha\,(1 - n_\alpha) - D_\beta\, n_\beta$$

$$\Delta_{\alpha\beta} = \sum_r D^2_r\,(g_r - \delta_{\alpha\, r} - \delta_{\beta\, r})\, n_r\,(1 - n_r)$$

$f_{\alpha\beta}$ – сила осциллятора

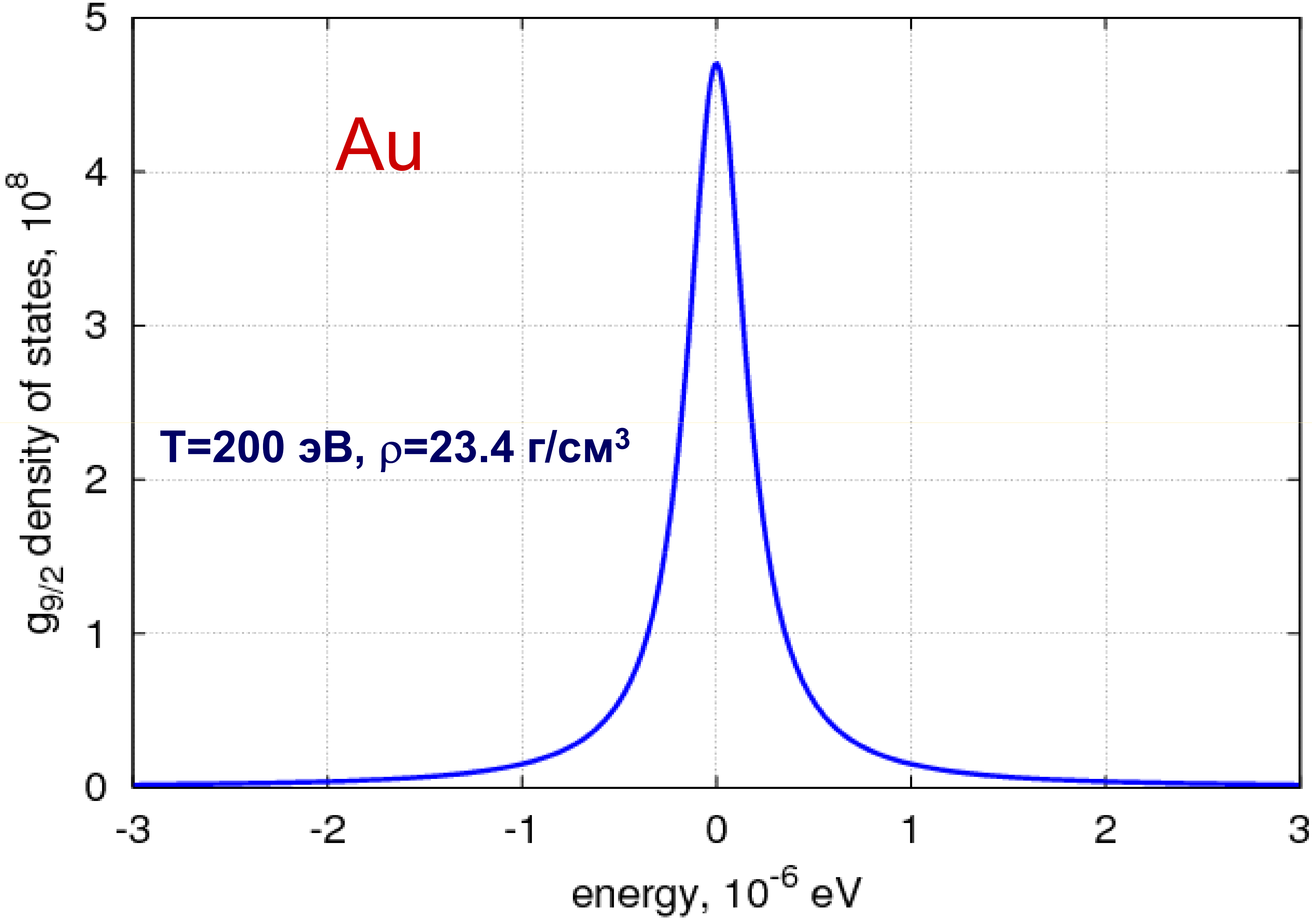
$K(x, y)$ – функция Фойгта

$\Delta_{\alpha\beta}$ – флуктуационная ширина линии

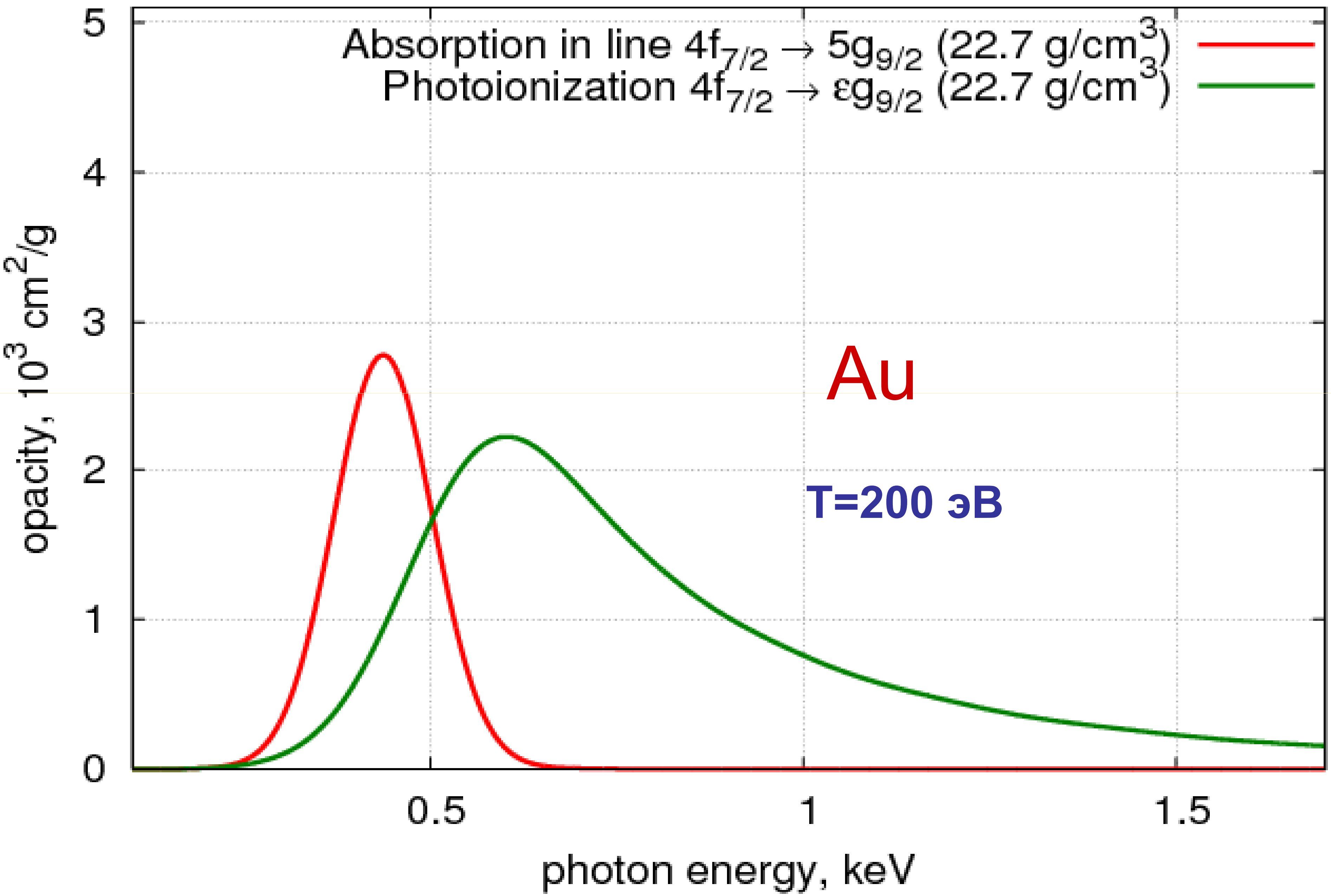
$D_{\alpha\beta}$ – доплеровское уширение

$\gamma_{\alpha\beta}$ – лоренцовская ширина линии (сумма радиационного и столкновительного уширения)

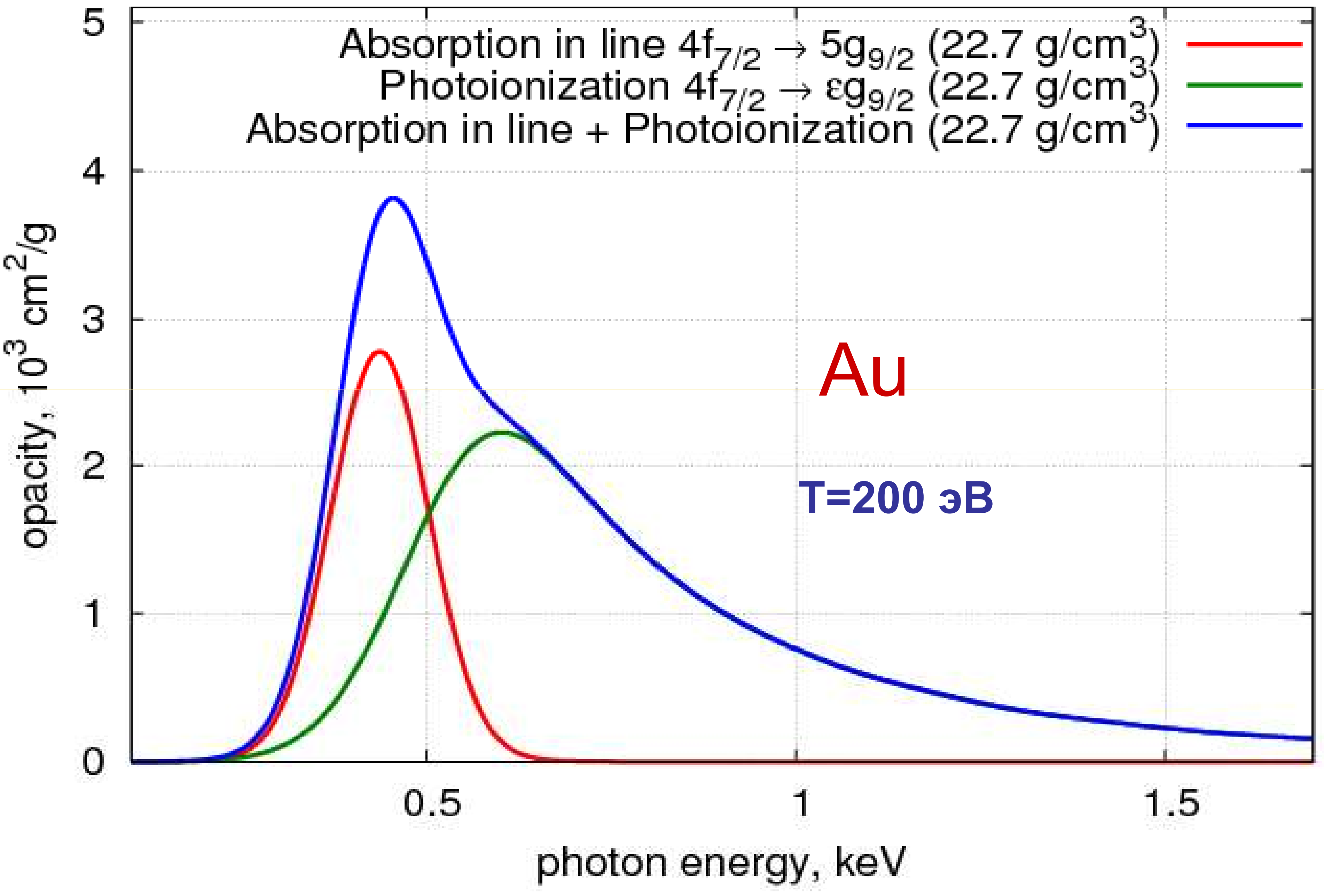
Плотность состояний в резонансе $g_{9/2}$



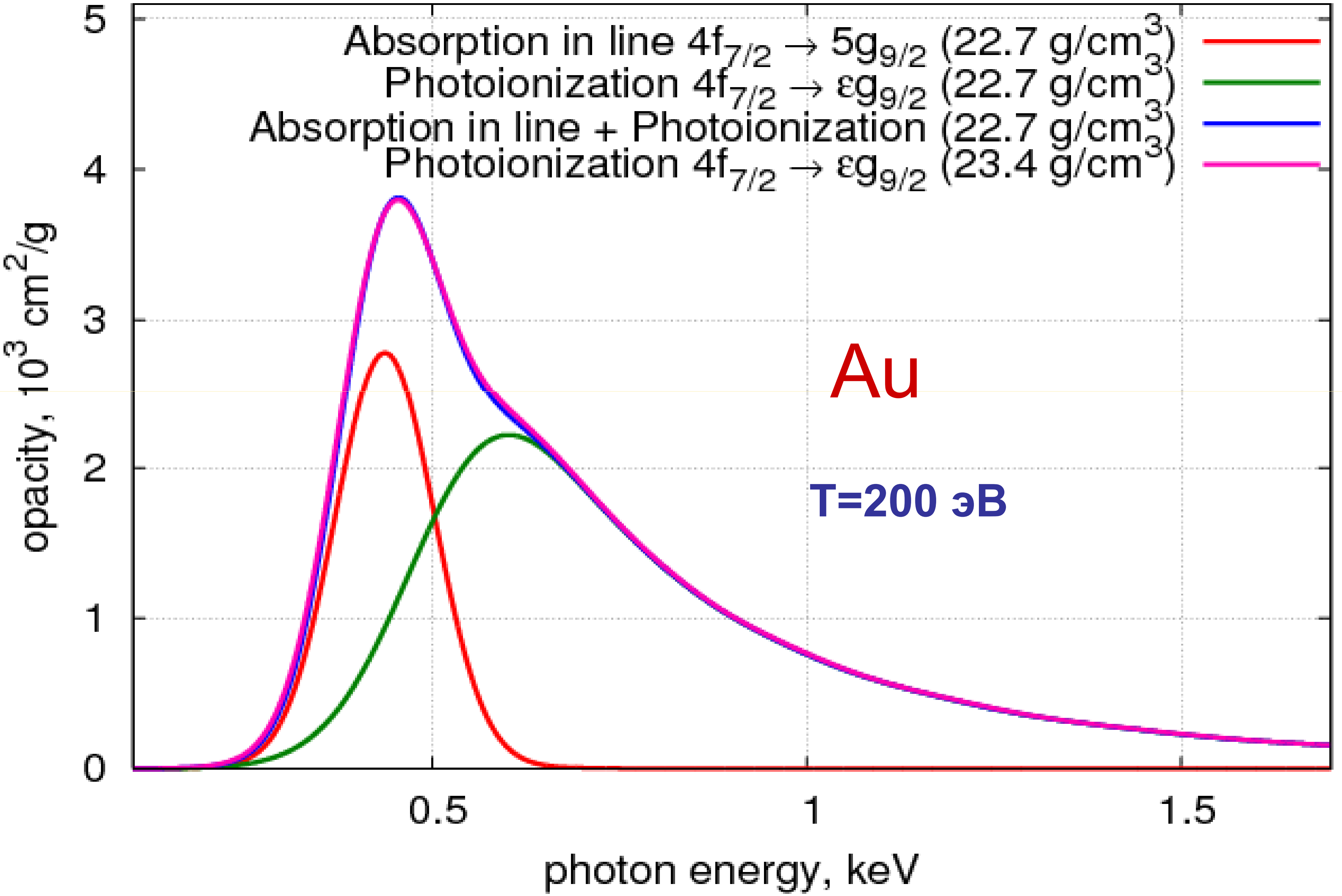
Спектральный коэффициент поглощения для перехода из состояния $4f_{7/2}$ в g-состояния с j=9/2



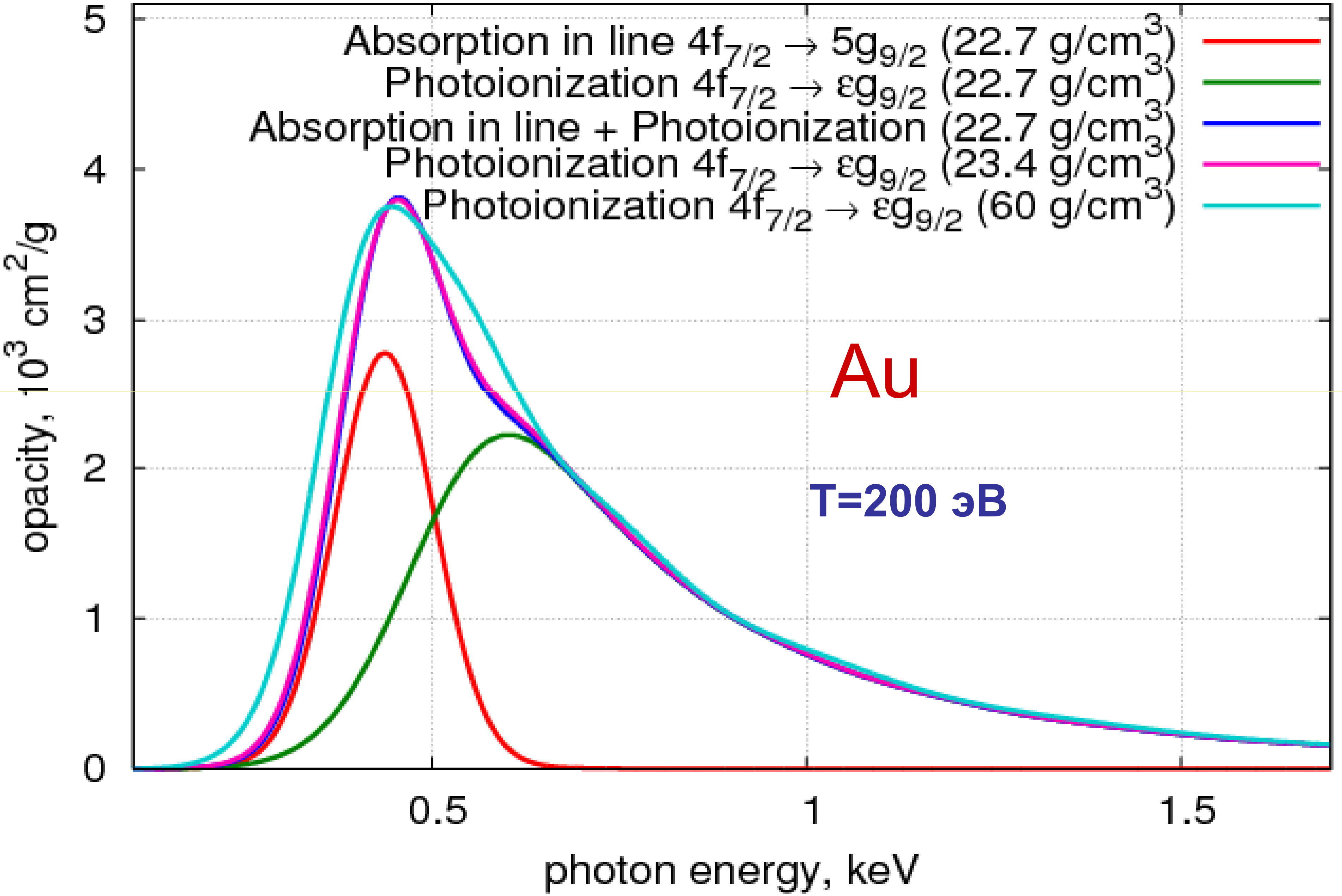
Спектральный коэффициент поглощения для перехода из состояния $4f_{7/2}$ в g-состояния с j=9/2



Спектральный коэффициент поглощения для перехода из состояния $4f_{7/2}$ в g-состояния с j=9/2



Спектральный коэффициент поглощения для перехода из состояния $4f_{7/2}$ в g-состояния с j=9/2



Построение набора суперконфигураций при описании поглощения в линиях

- *A. Bar-Shalom, J. Oreg, W.H. Goldstein, D. Shvarts, A. Zigler //* Phys. Rev. A 40, 1989, p.3183.

- *В.В. Драгалов, А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков, В.Б. Уваров // Физика плазмы*, 1990, т.16, вып.1, с. 77.

суперконфигурация $$\Xi \equiv \prod_{\sigma} \sigma^{Q_\sigma}, \quad \sigma^{Q_\sigma} \equiv \sum_{\left\{\sum_{s\in\sigma} q_s = Q_\sigma\right\}} \prod_{s} (n_s l_s j_s)^{q_s}$$

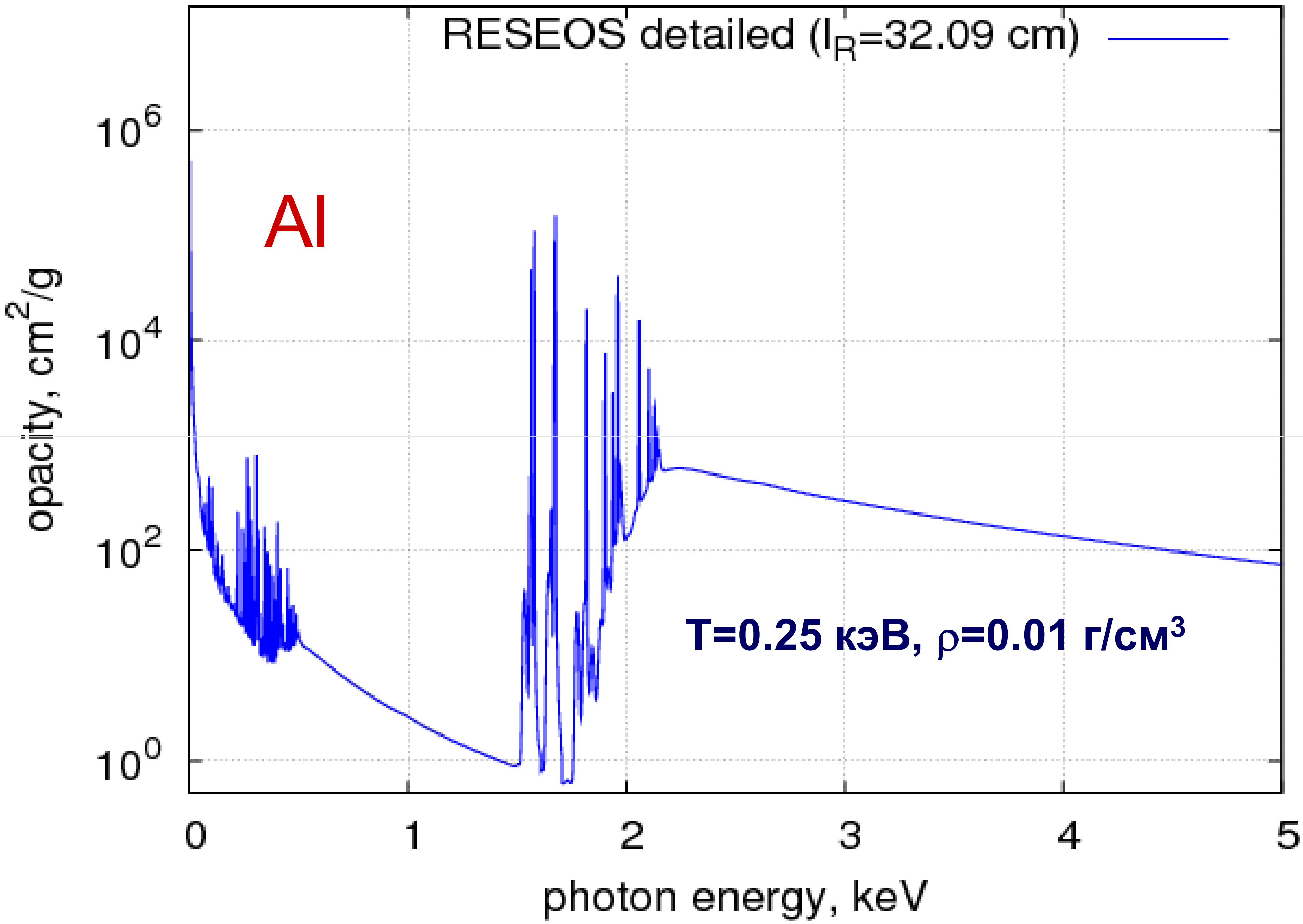
например: $$\Xi = (1s)^2\,(2s\,2p)^7\,(3s\,3p\,3d\,4s\,4p\,4d\,4f)^1$$

<u>Приближение:</u> для описания спектра в супероболочки объединяются только нижние частично ионизованные подоболочки; каждая суперконфигурация определяется набором таких супероболочек с конкретными числами заполнения и набором всех остальных подоболочек со всеми возможными числами заполнения.

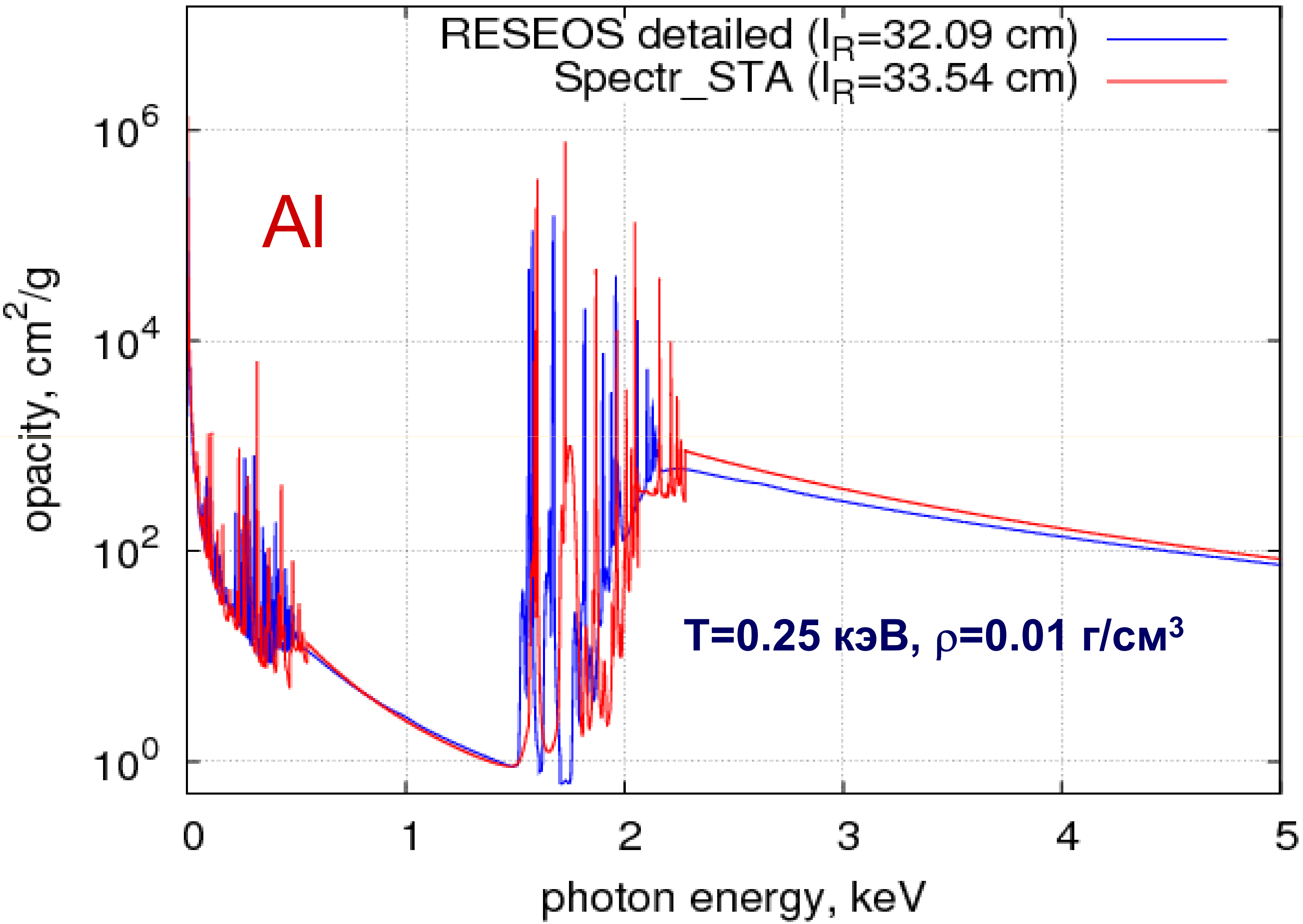
$$(\Delta\varepsilon)_{\alpha\beta} = \sum_{\sigma} (\Delta\varepsilon)^{\sigma}_{\alpha\beta} + D_\alpha\,(1-n_\alpha)\,\left(1-\delta_{\alpha\{\sigma\}}\right) - D_\beta\, n_\beta\,\left(1-\delta_{\beta\{\sigma\}}\right)$$

$$\Delta_{\alpha\beta} = \sum_{\sigma} \Delta^{\sigma}_{\alpha\beta} + \sum_{r\subsetneq\{\sigma\}} D_r\,(g_r - \delta_{\alpha r} - \delta_{\beta r})\, n_r\,(1-n_r)$$

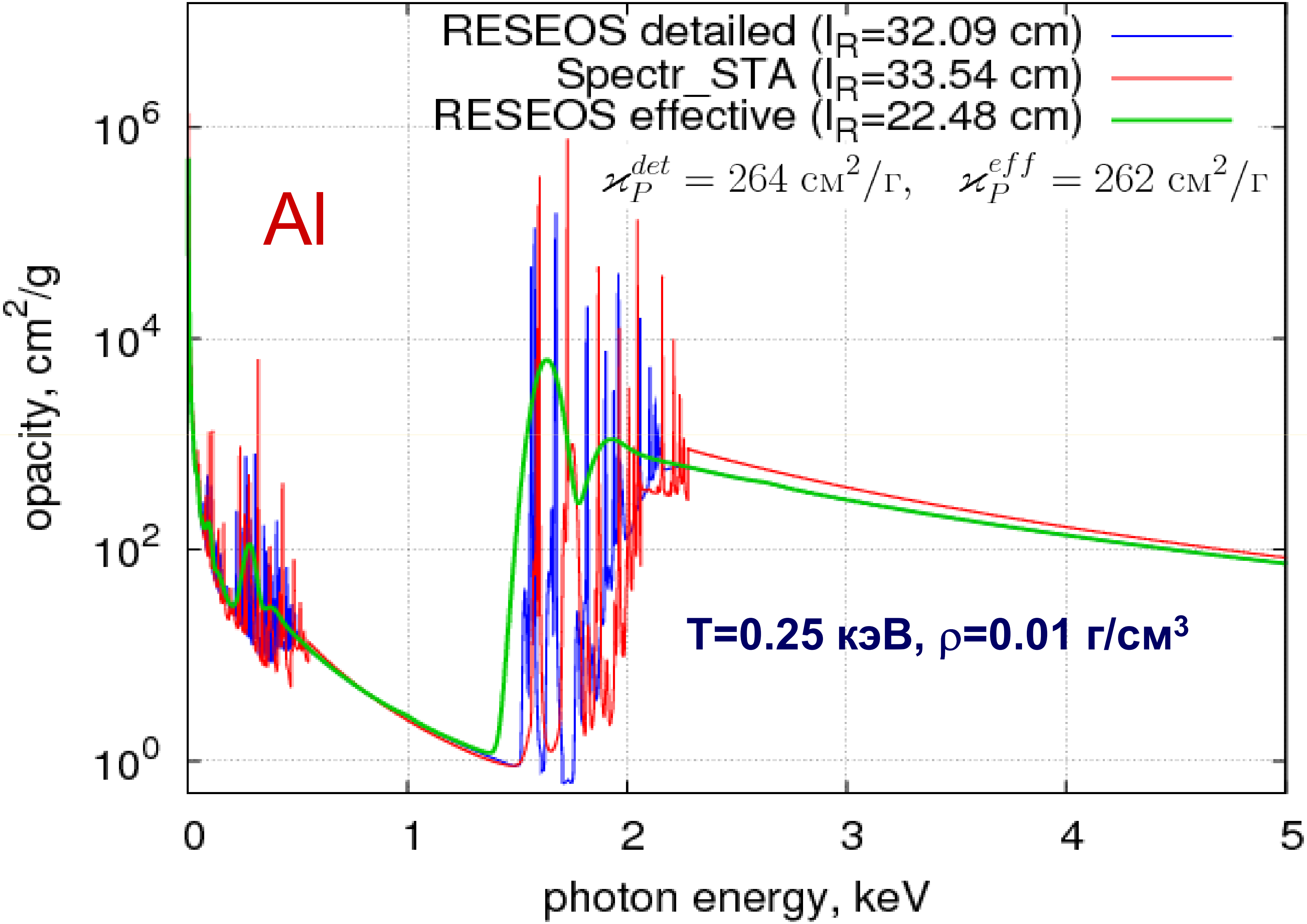
Спектральный коэффициент поглощения



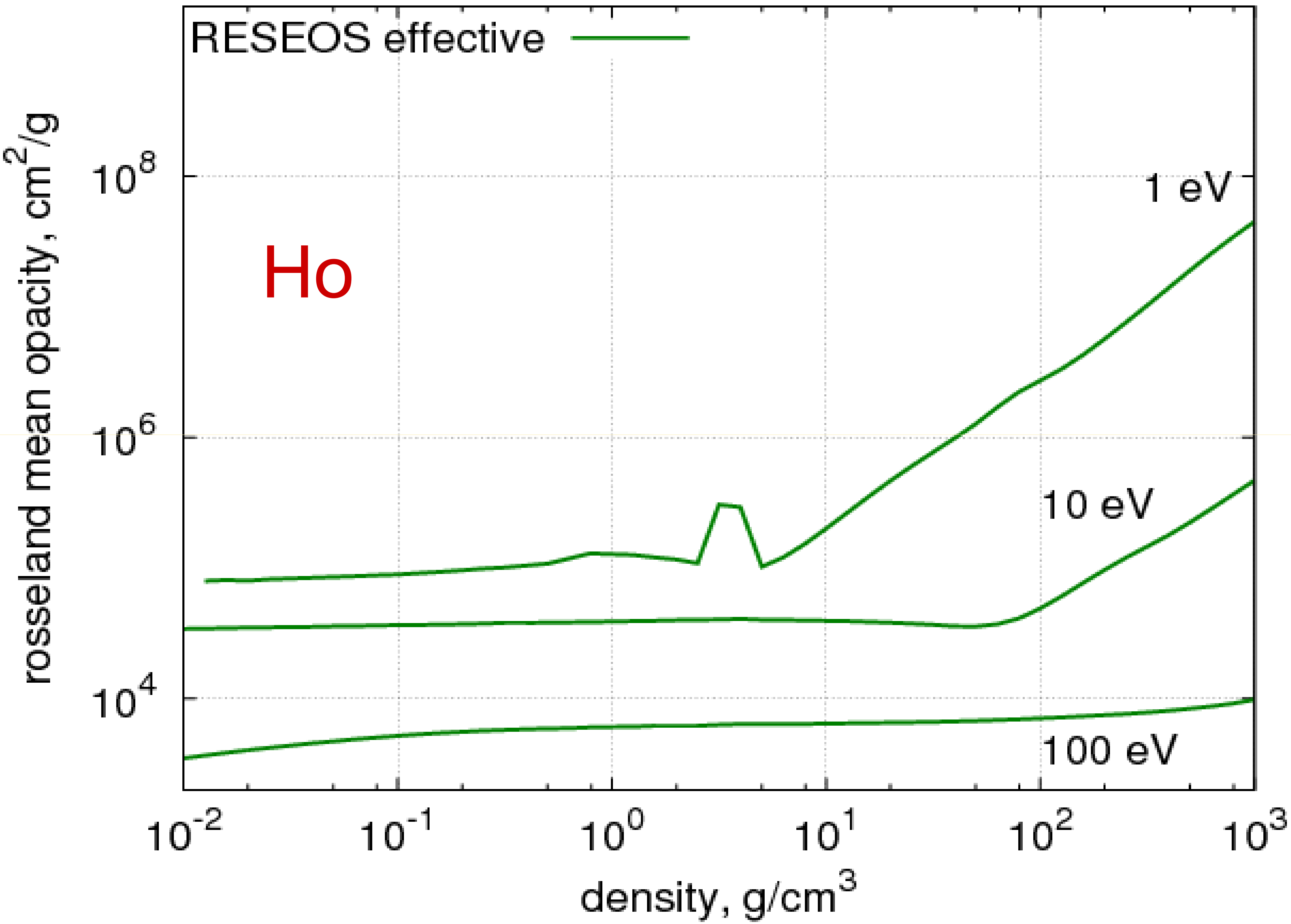
Спектральный коэффициент поглощения



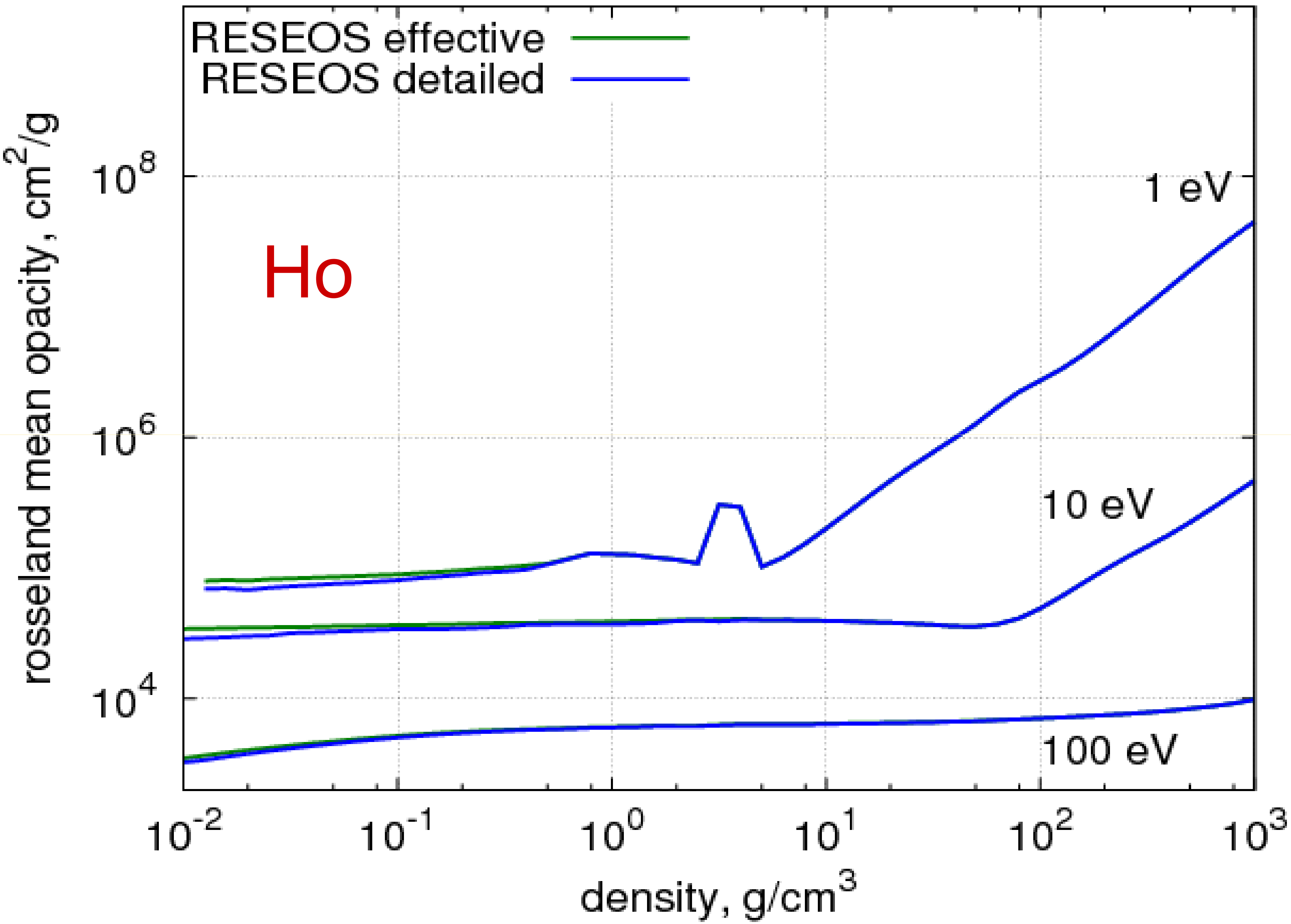
Спектральный коэффициент поглощения



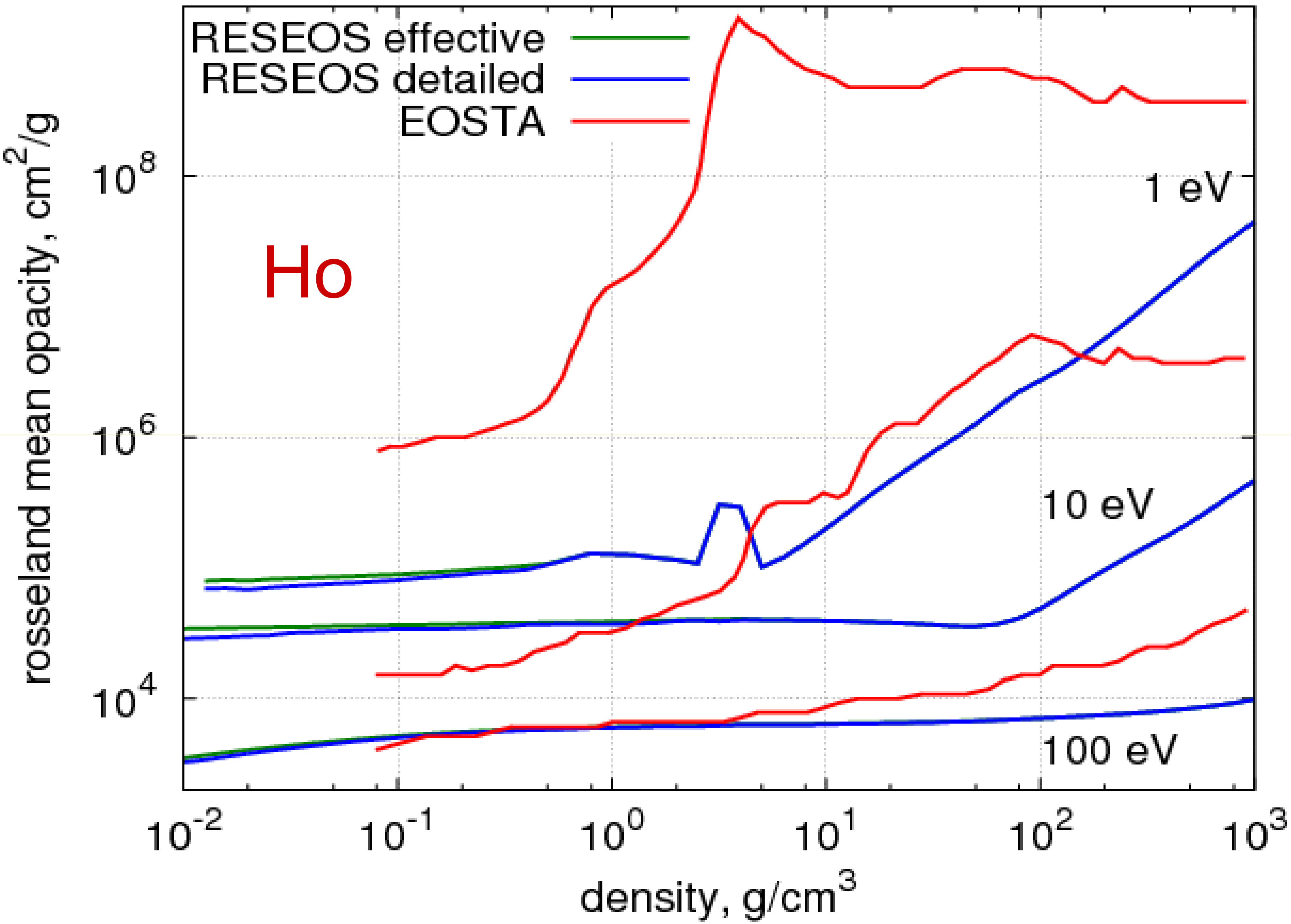
Росселандов коэффициент поглощения



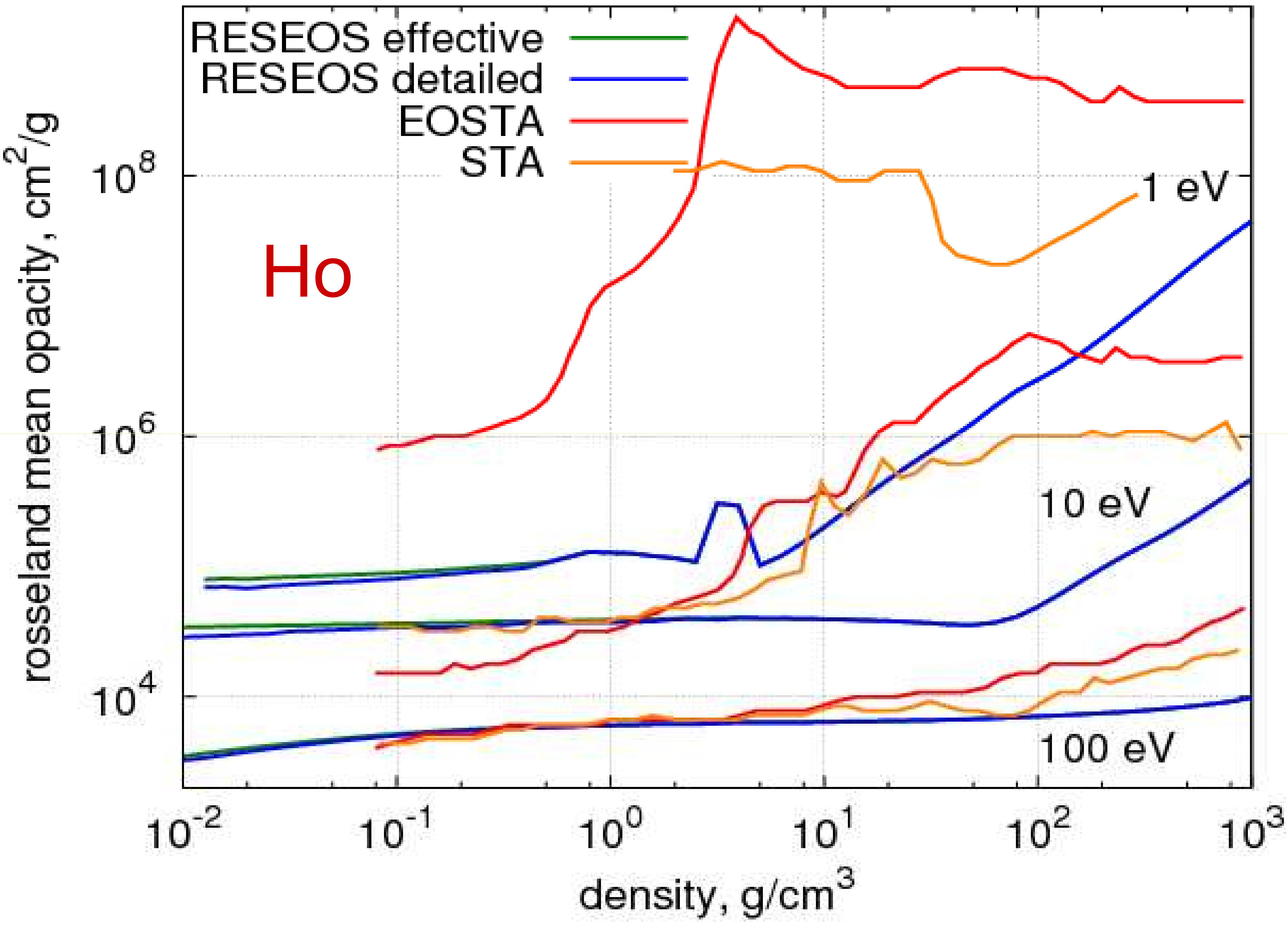
Росселандов коэффициент поглощения



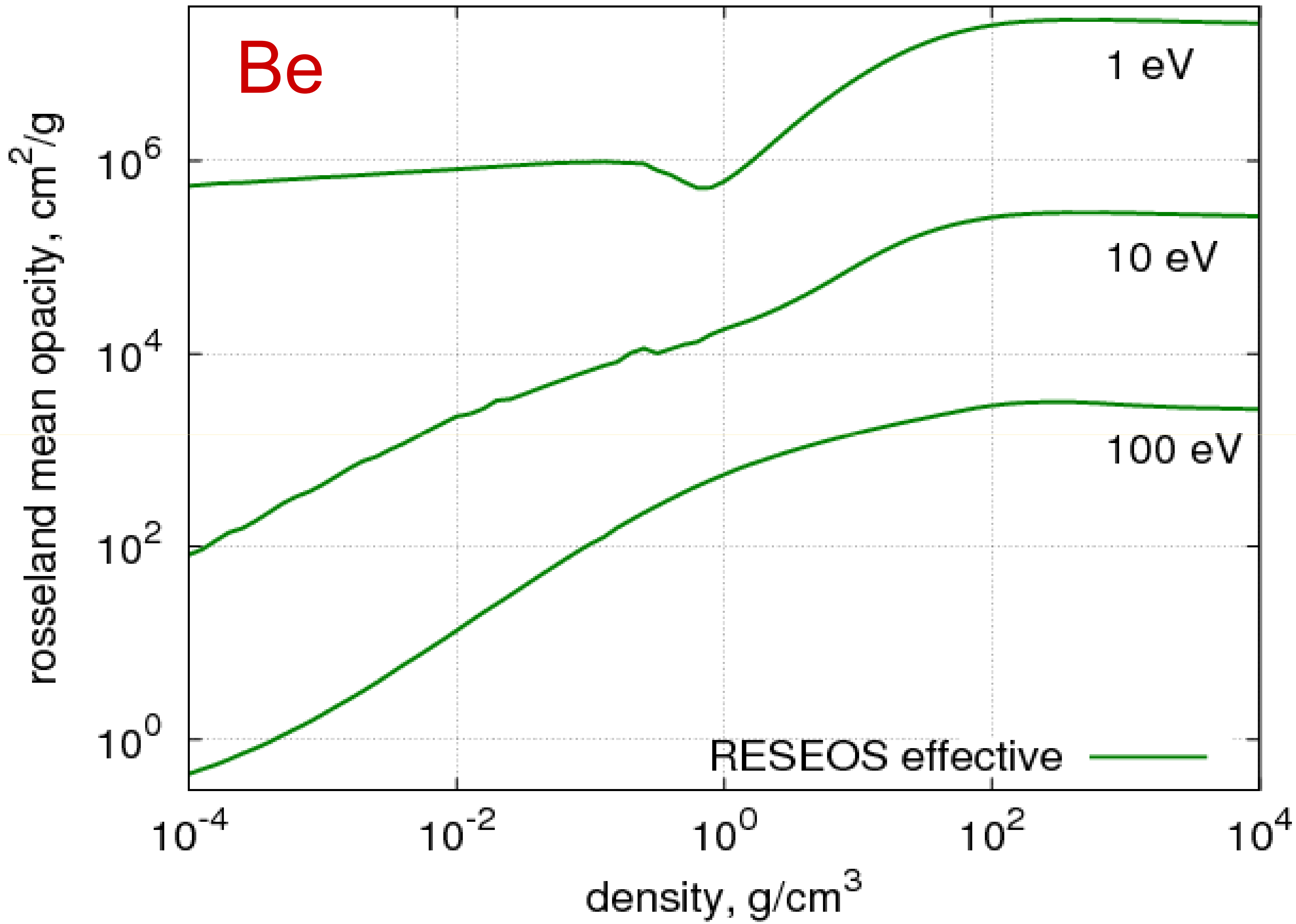
Росселандов коэффициент поглощения



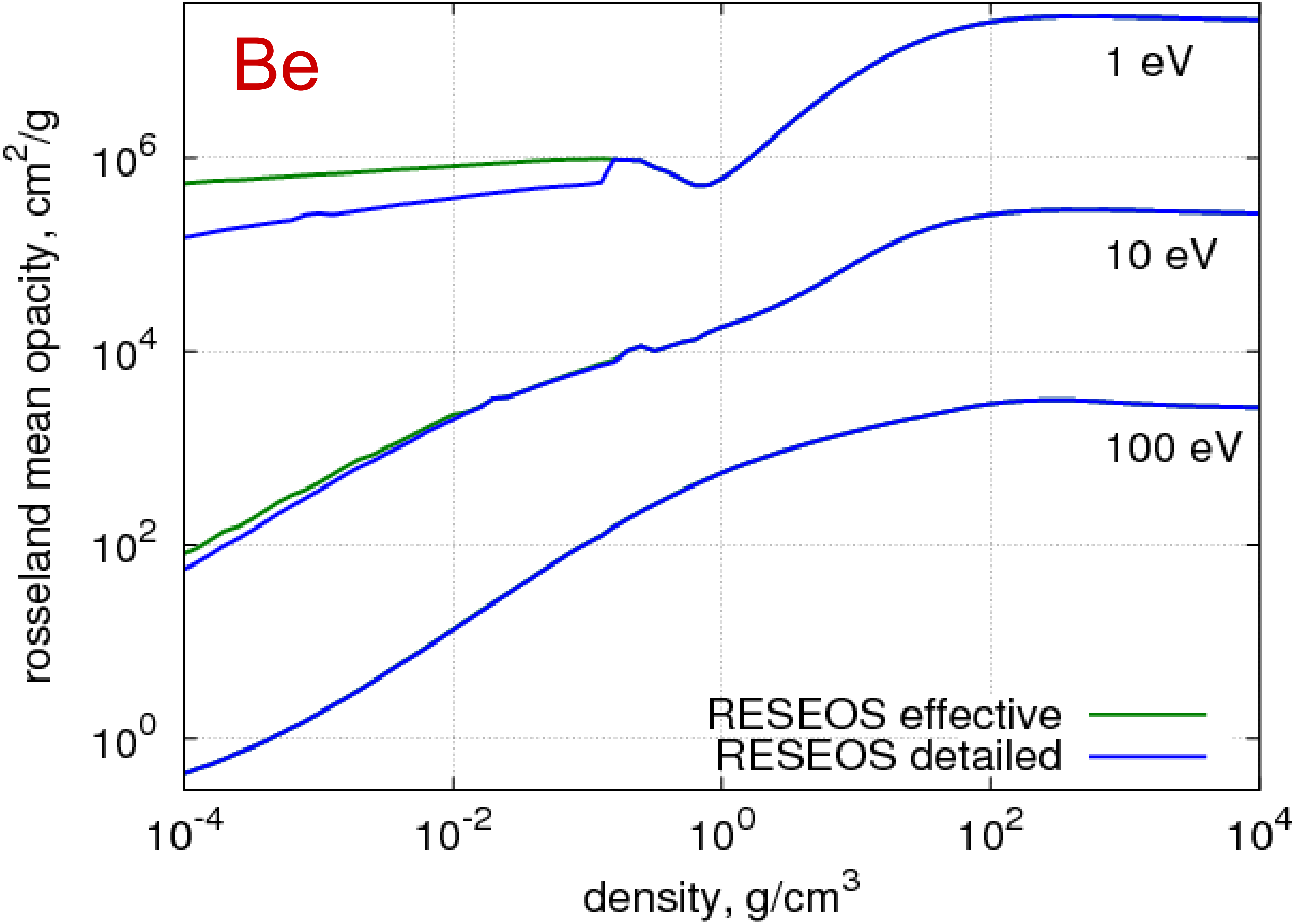
Росселандов коэффициент поглощения



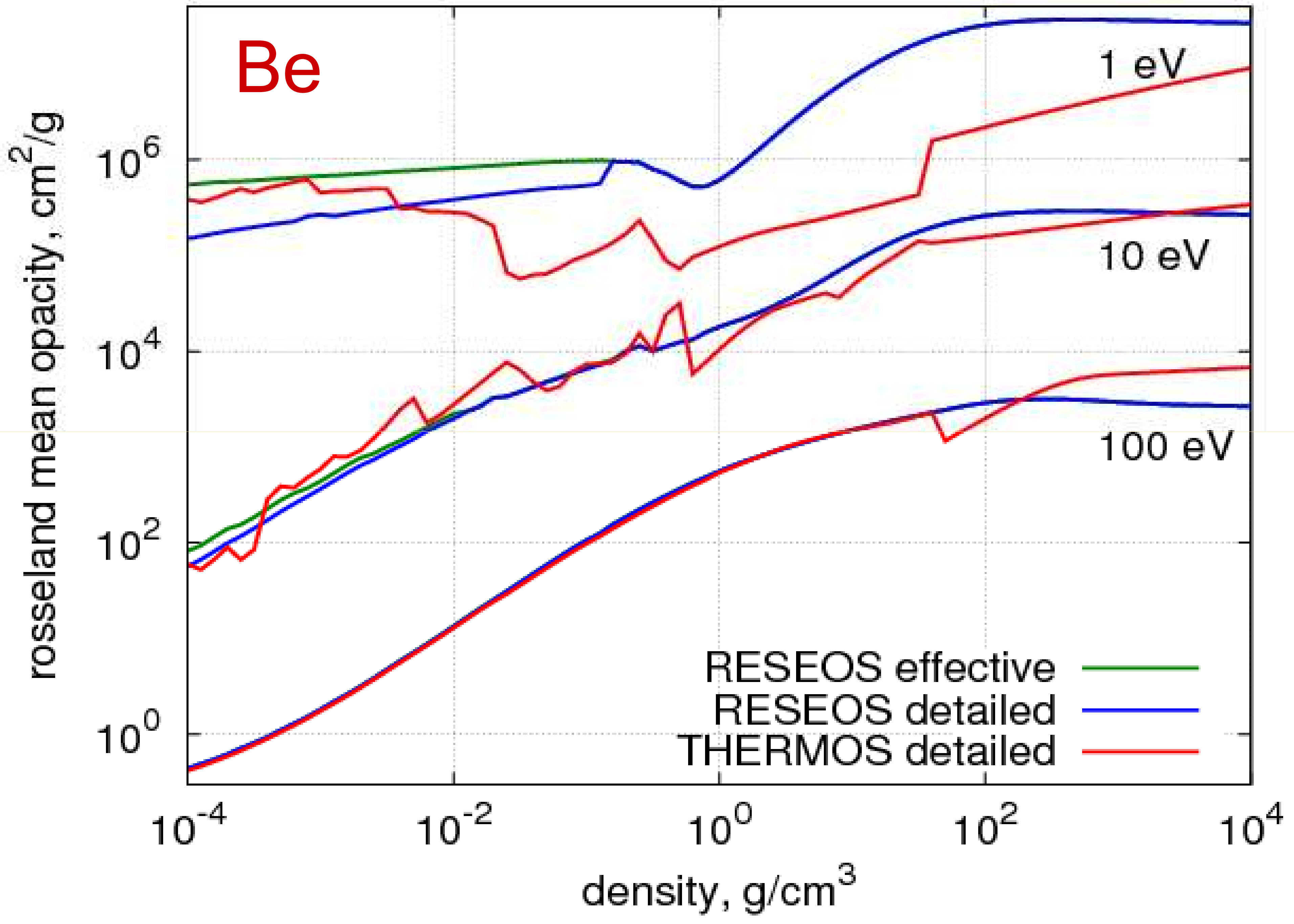
Росселандов коэффициент поглощения



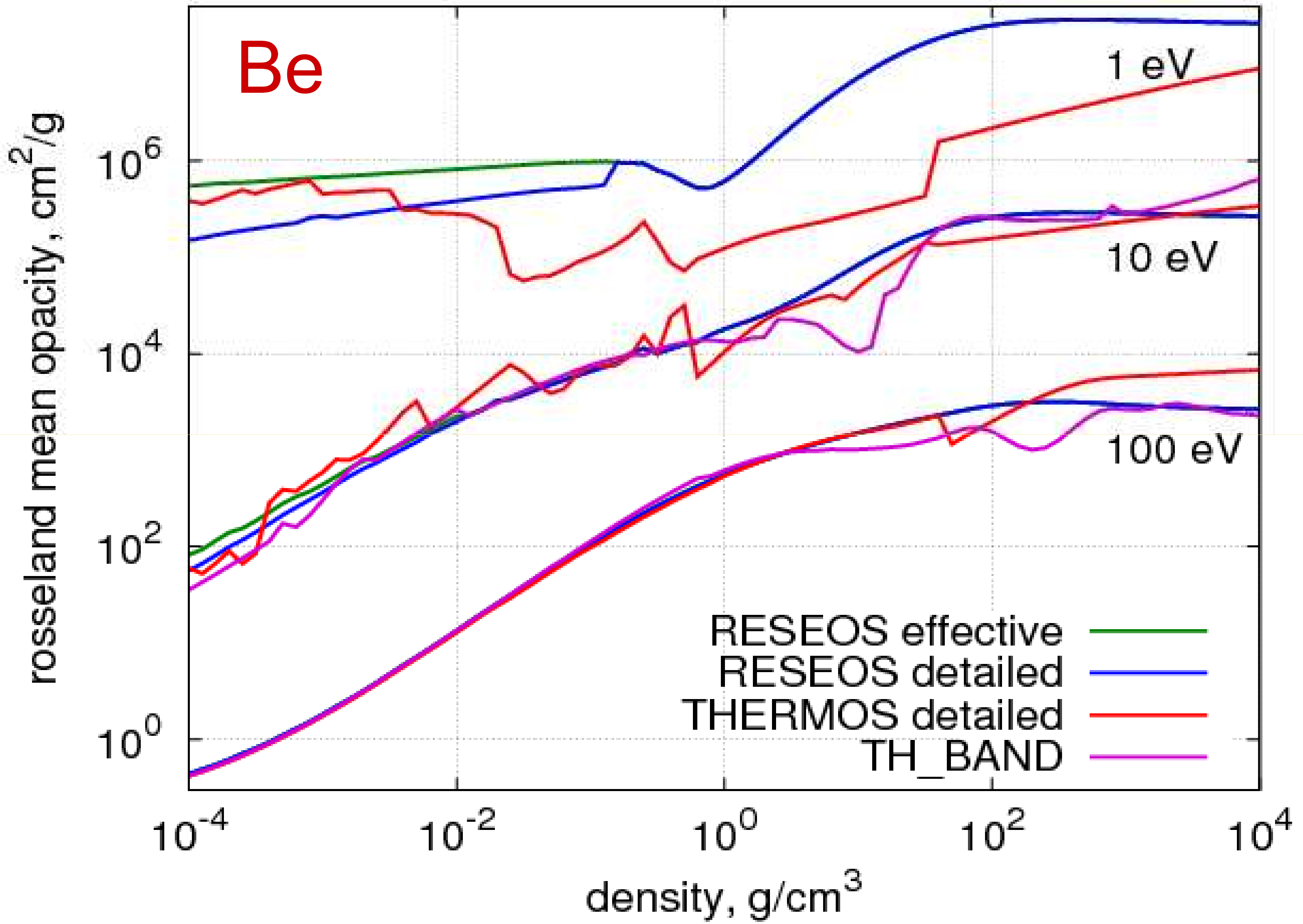
Росселандов коэффициент поглощения



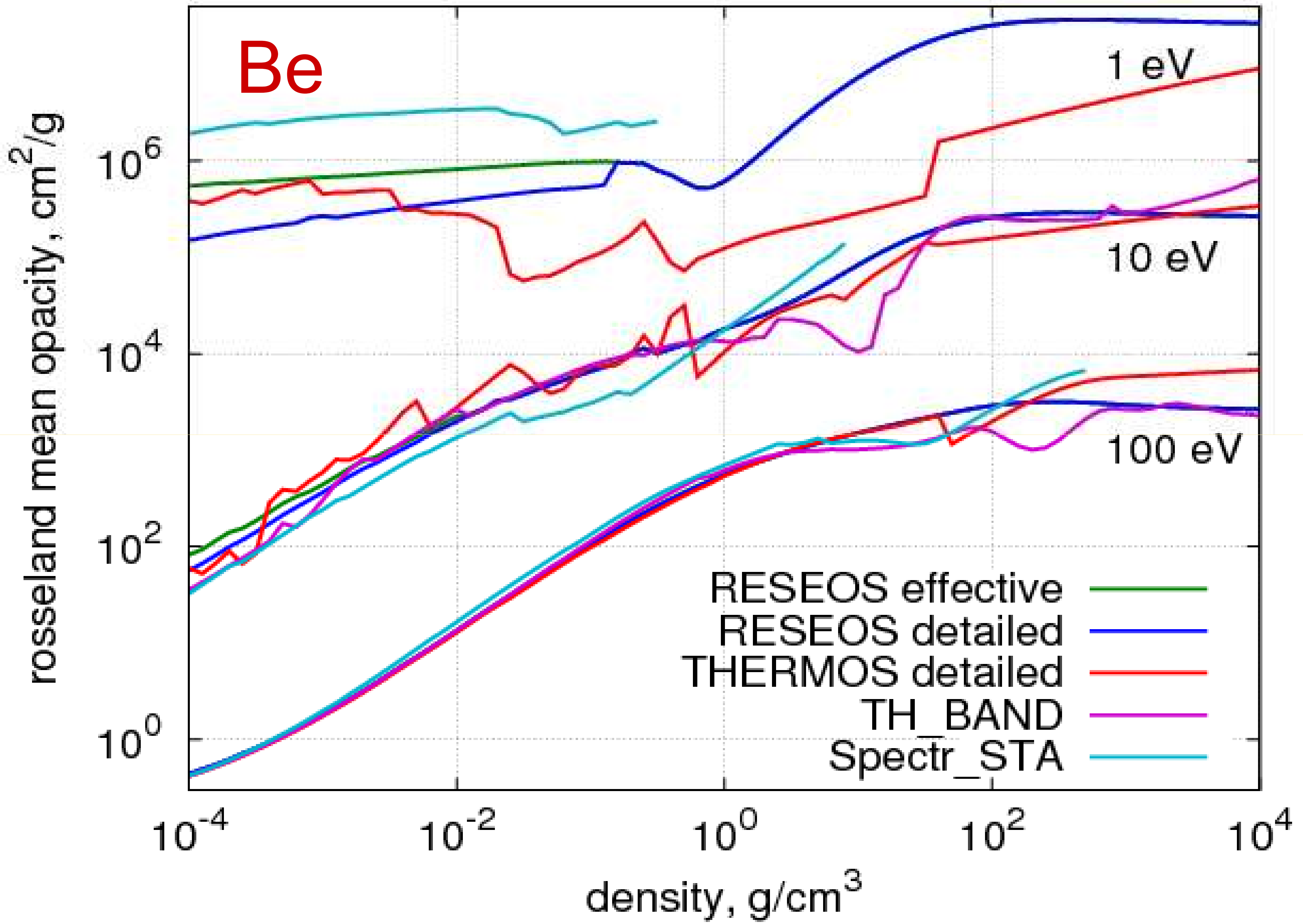
Росселандов коэффициент поглощения



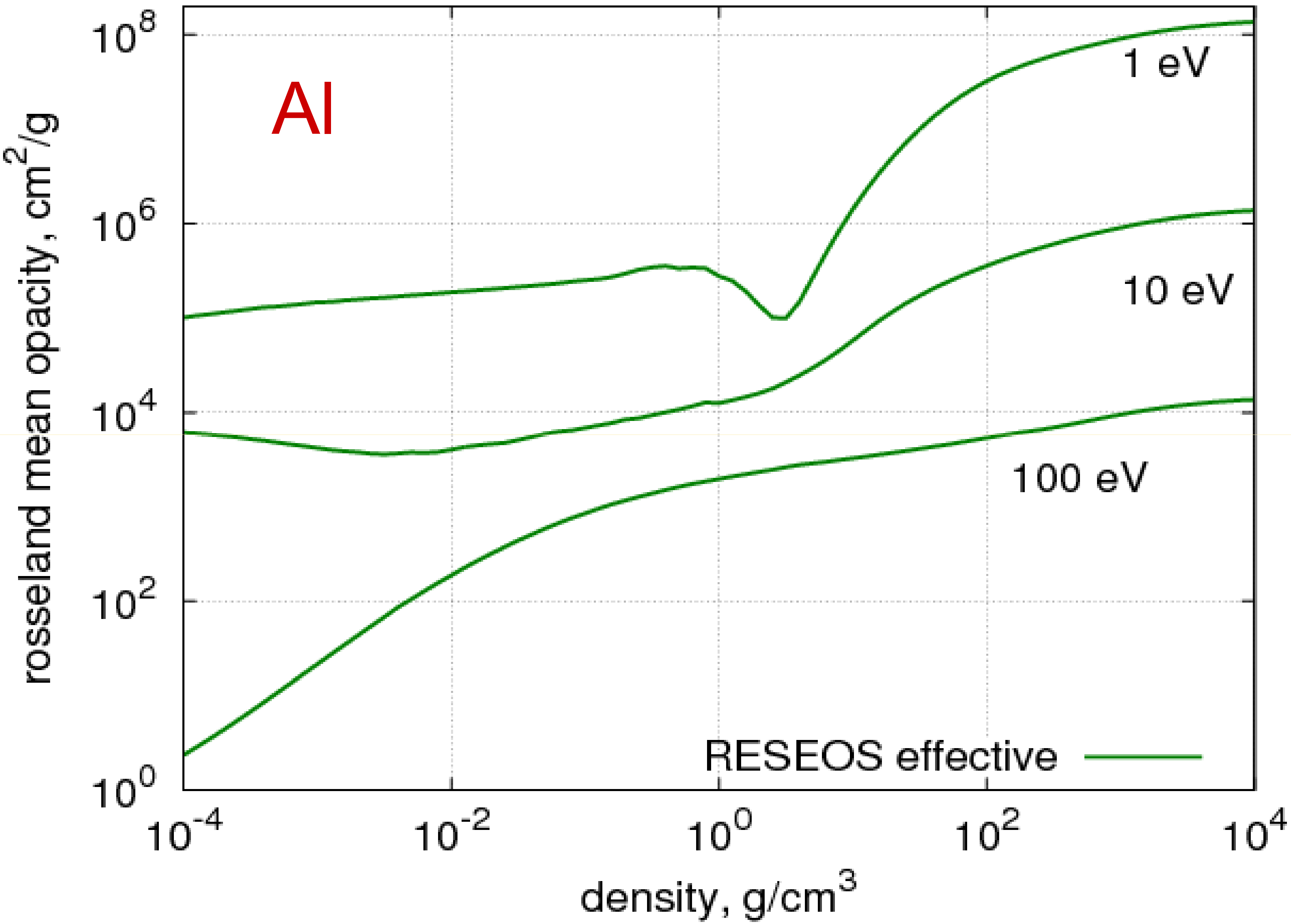
Росселандов коэффициент поглощения



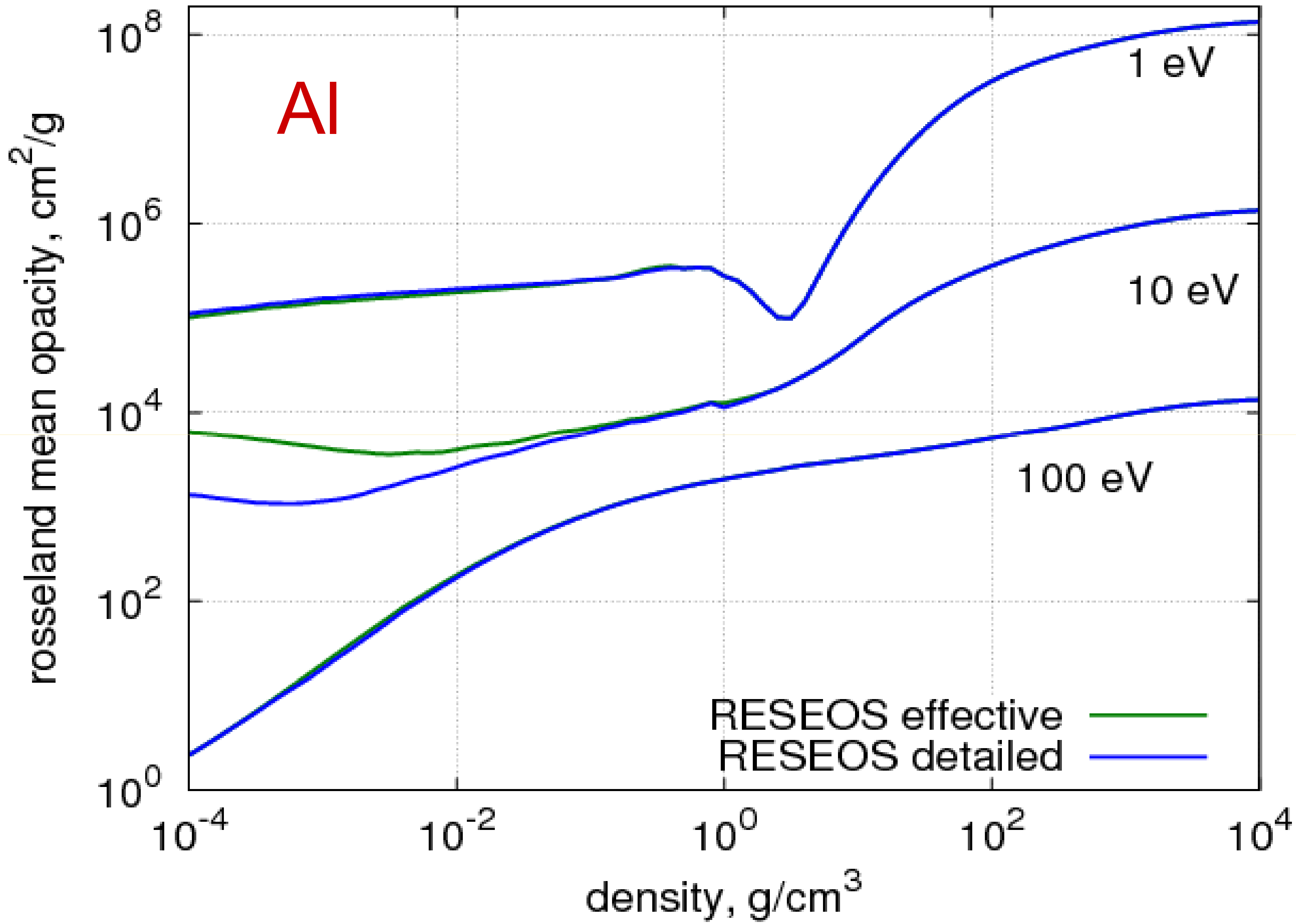
Росселандов коэффициент поглощения



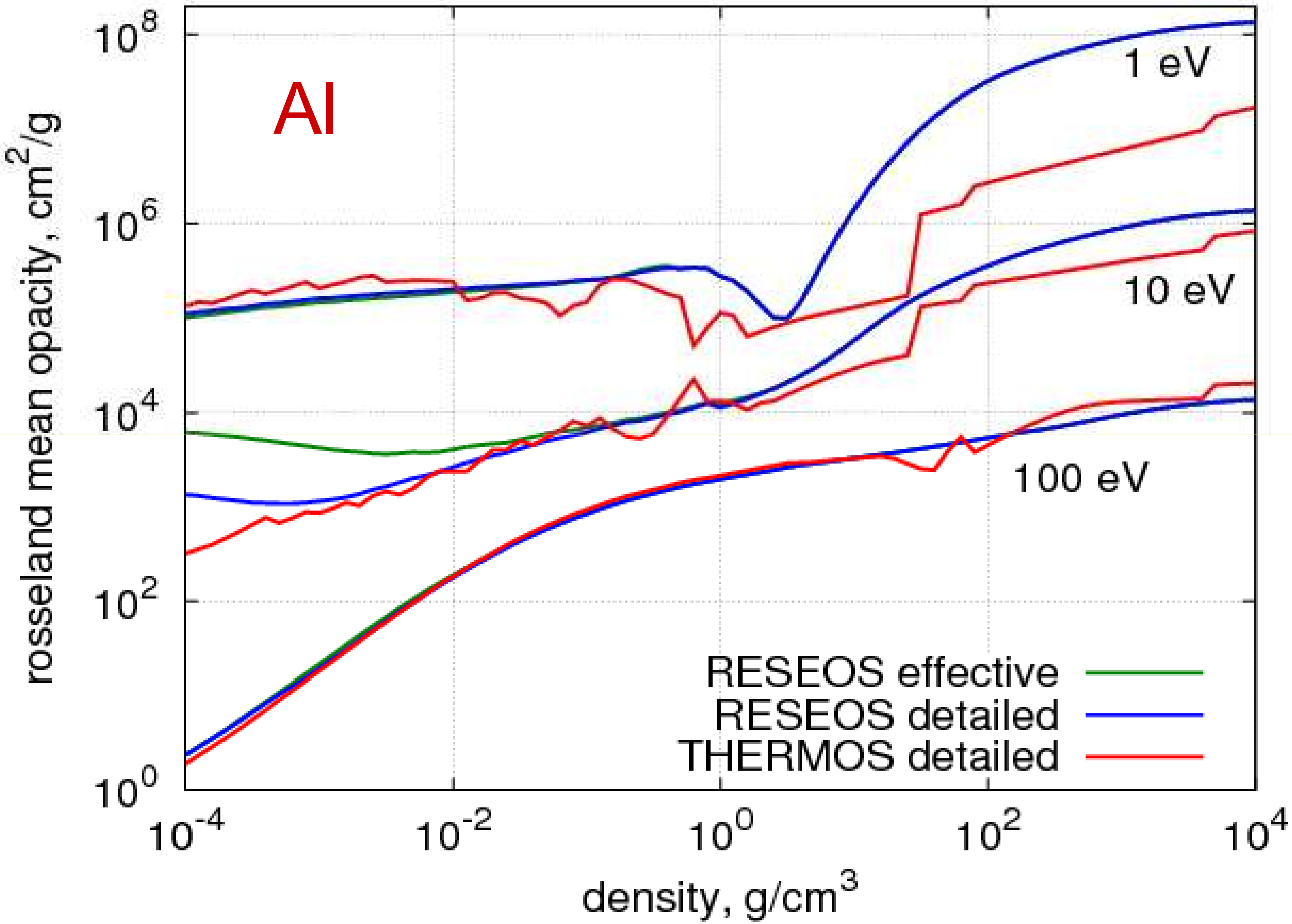
Росселандов коэффициент поглощения



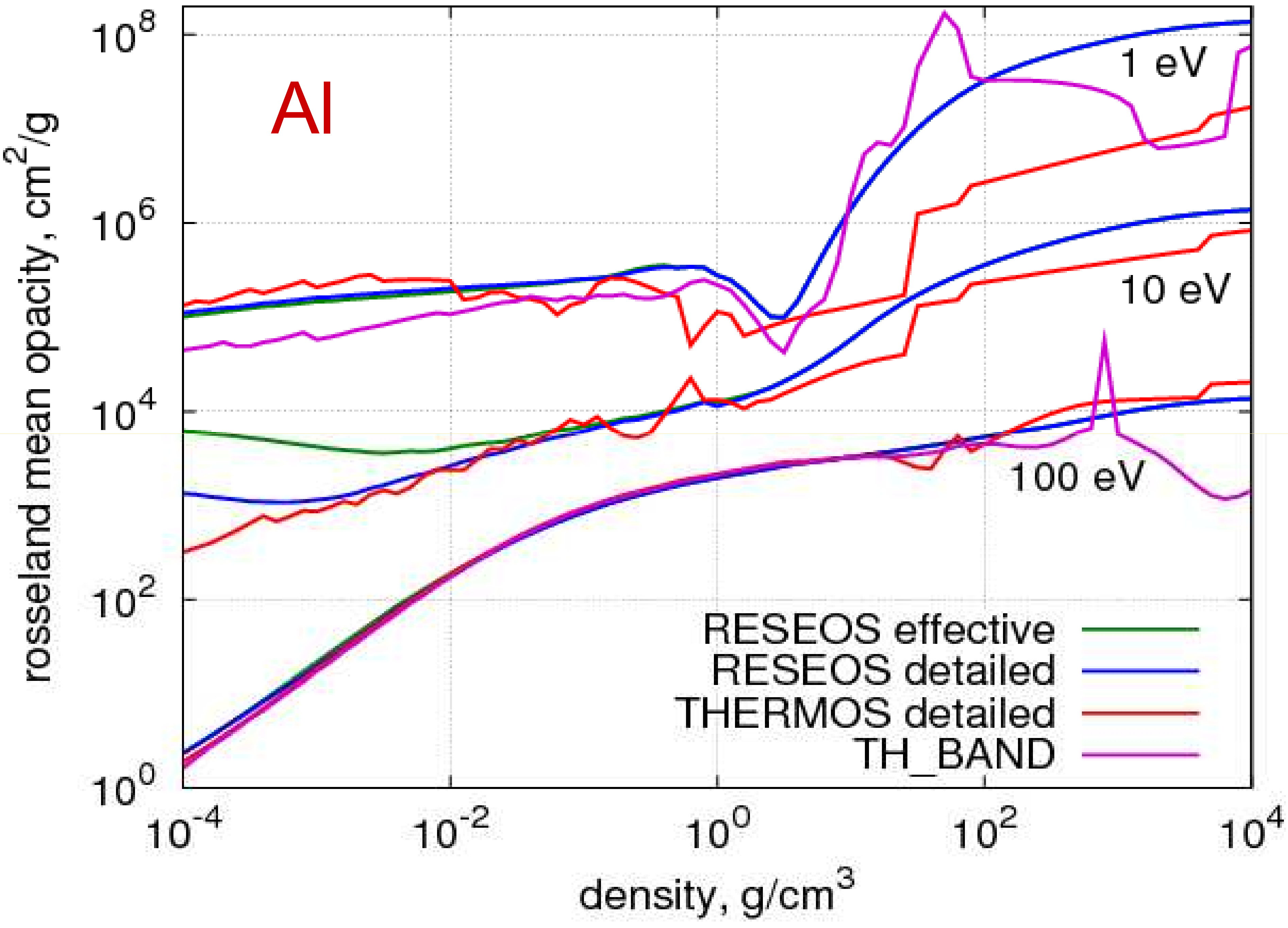
Росселандов коэффициент поглощения



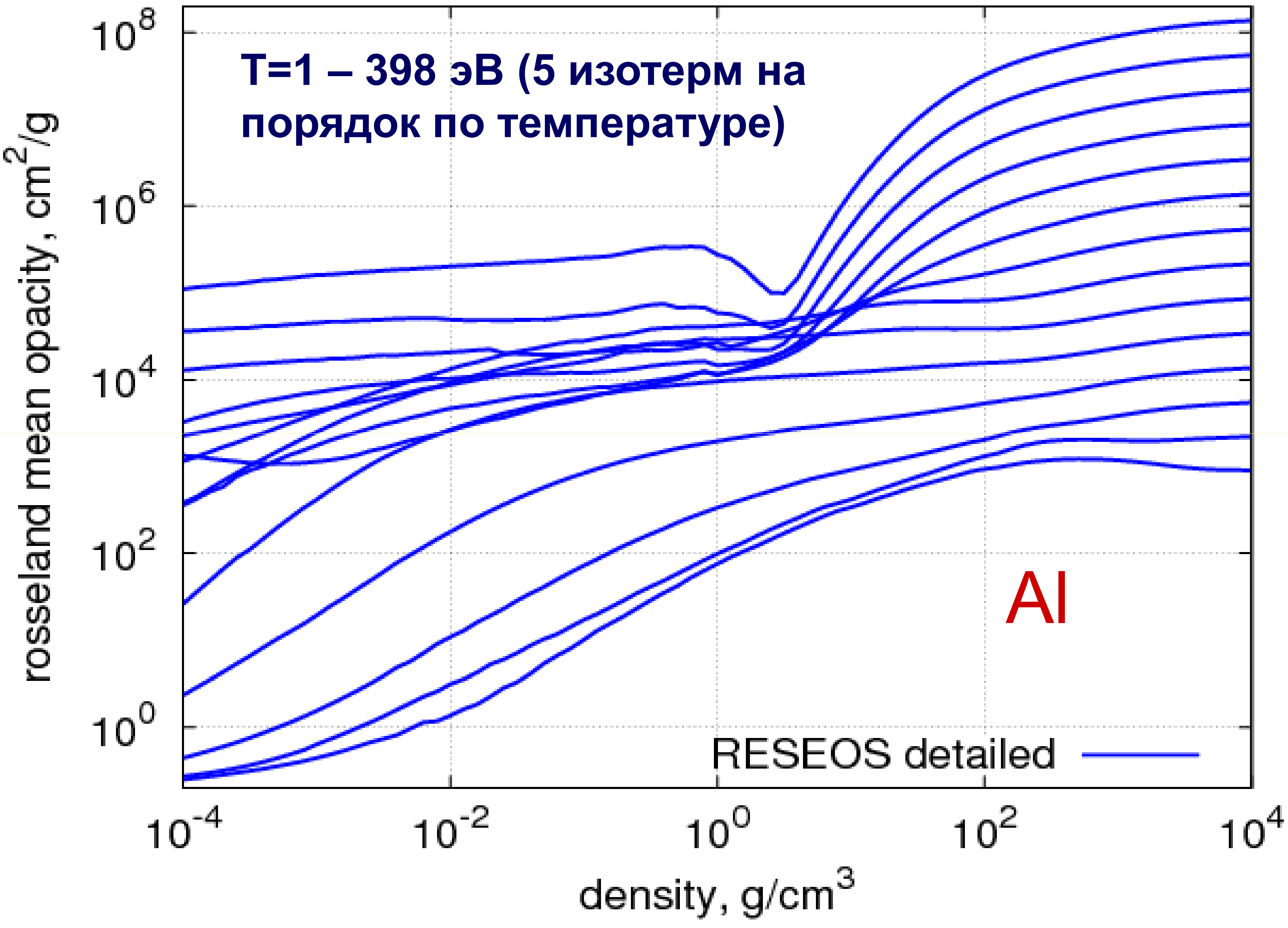
Росселандов коэффициент поглощения



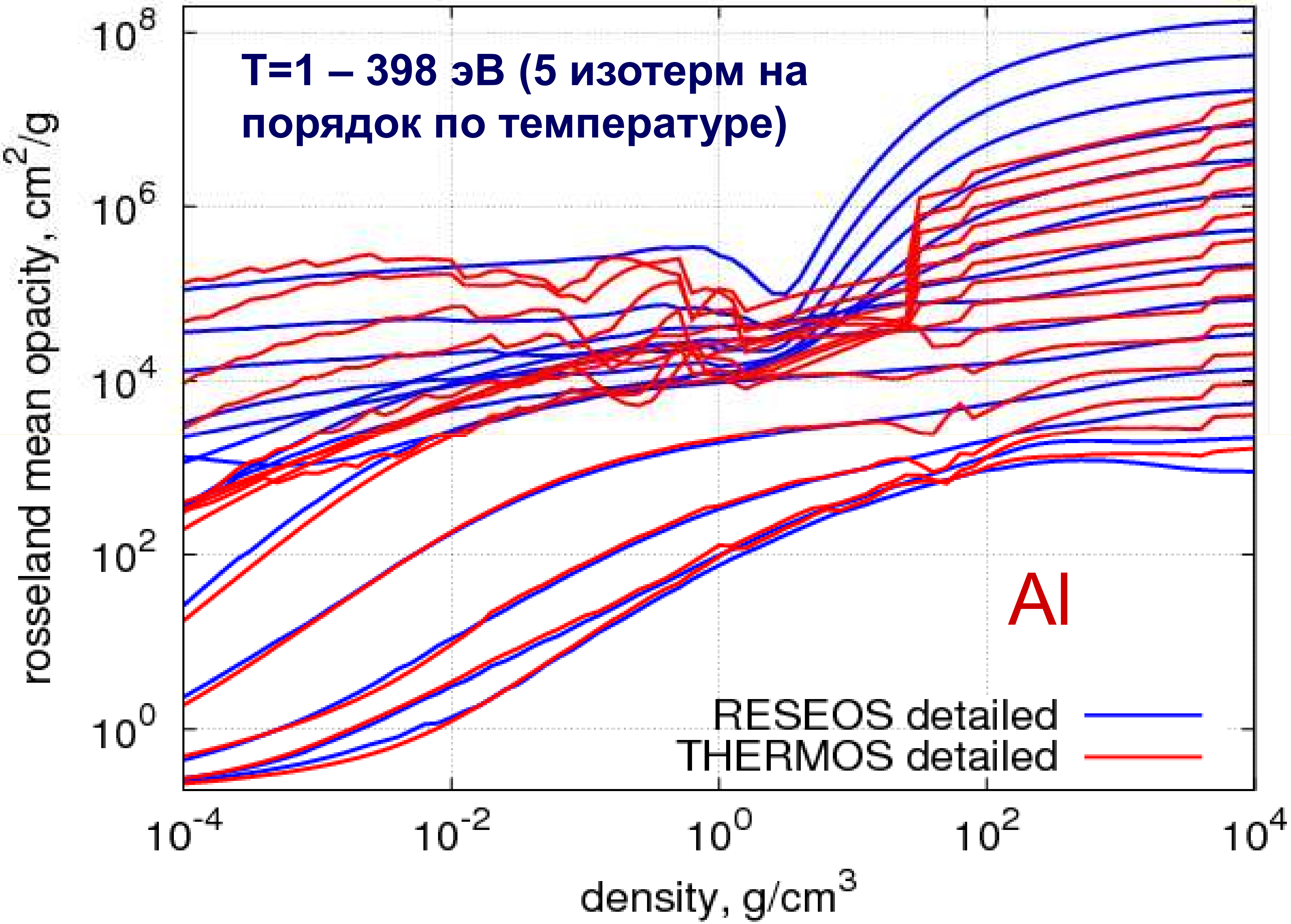
Росселандов коэффициент поглощения



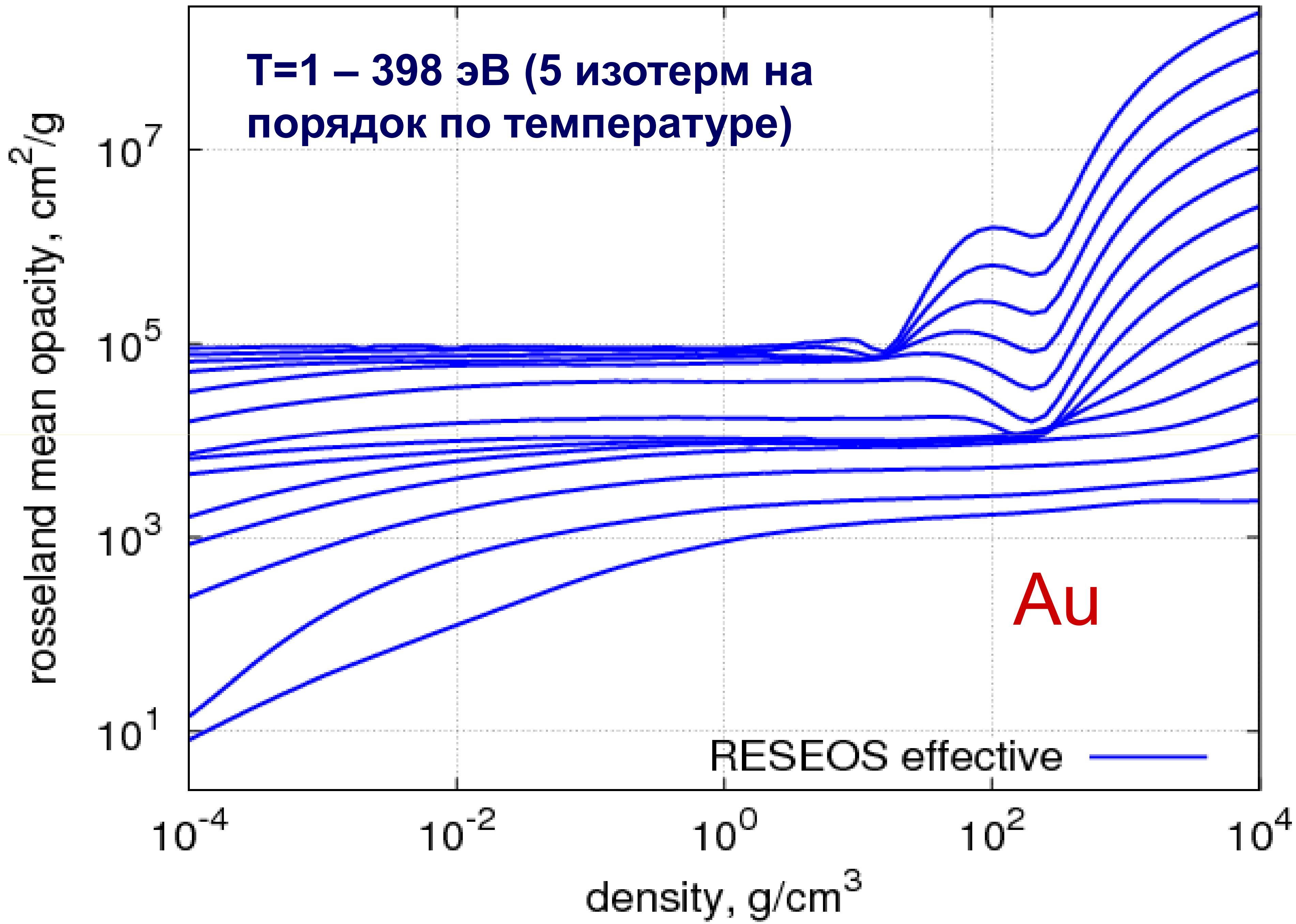
Росселандов коэффициент поглощения



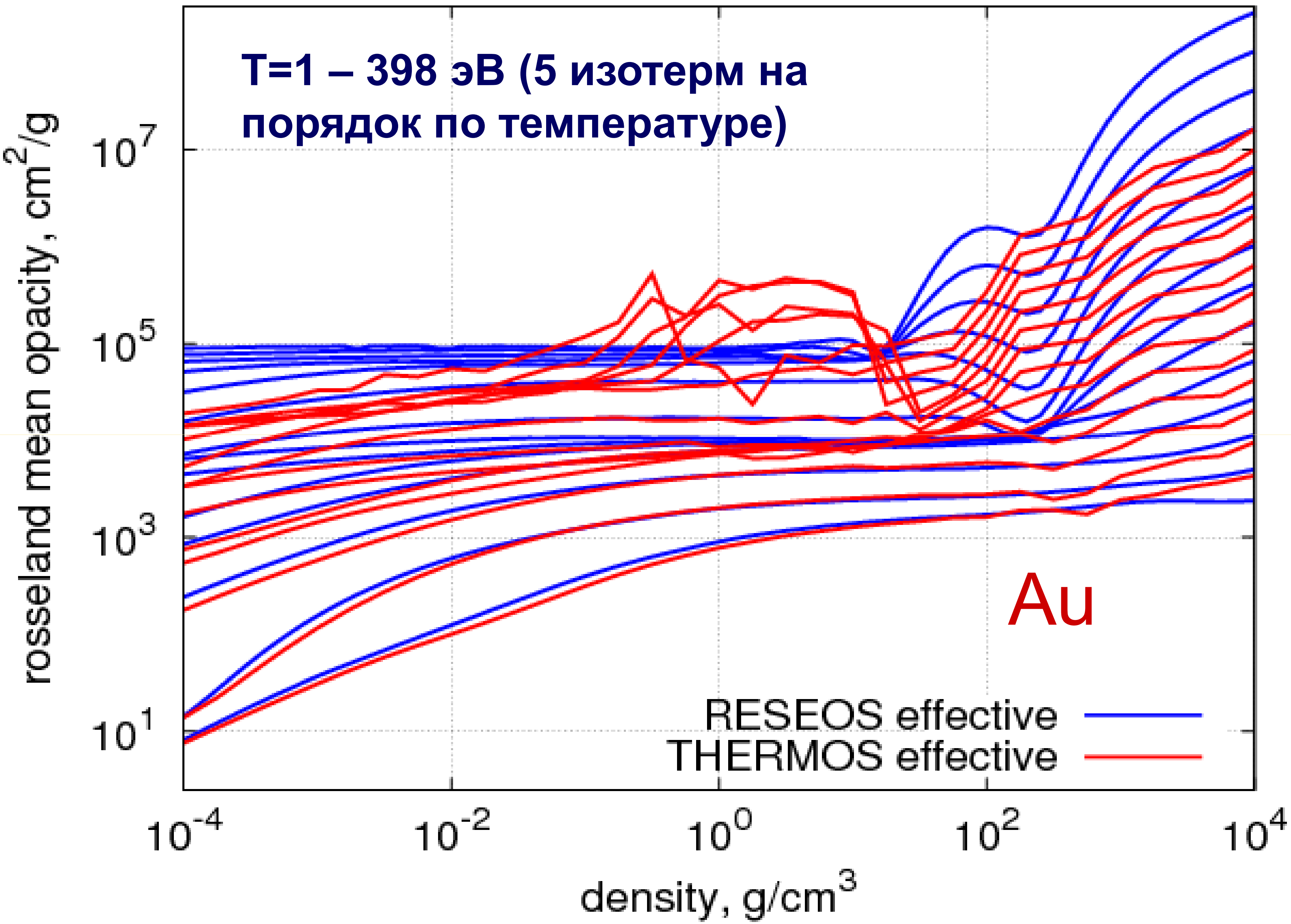
Росселандов коэффициент поглощения



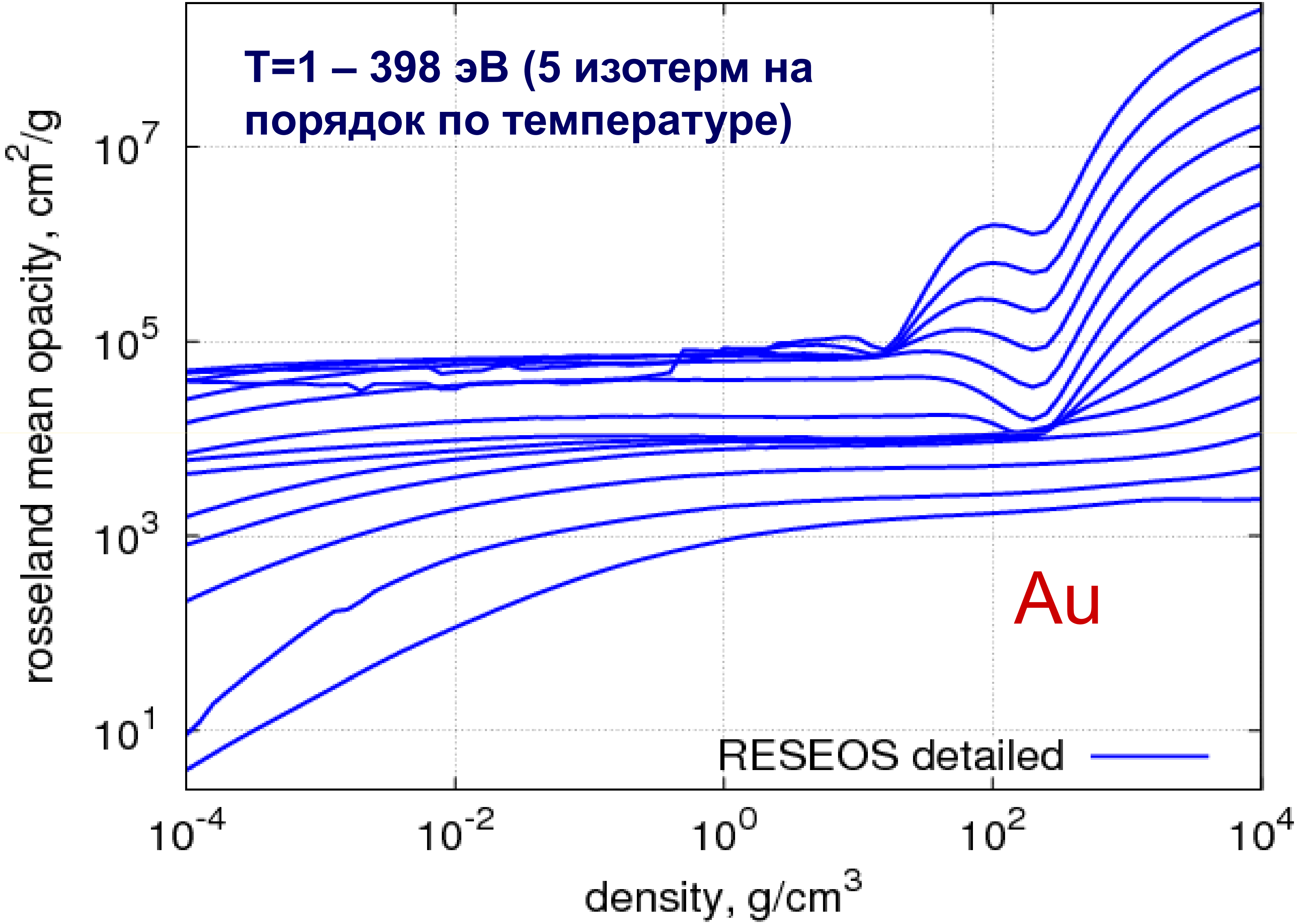
Росселандов коэффициент поглощения



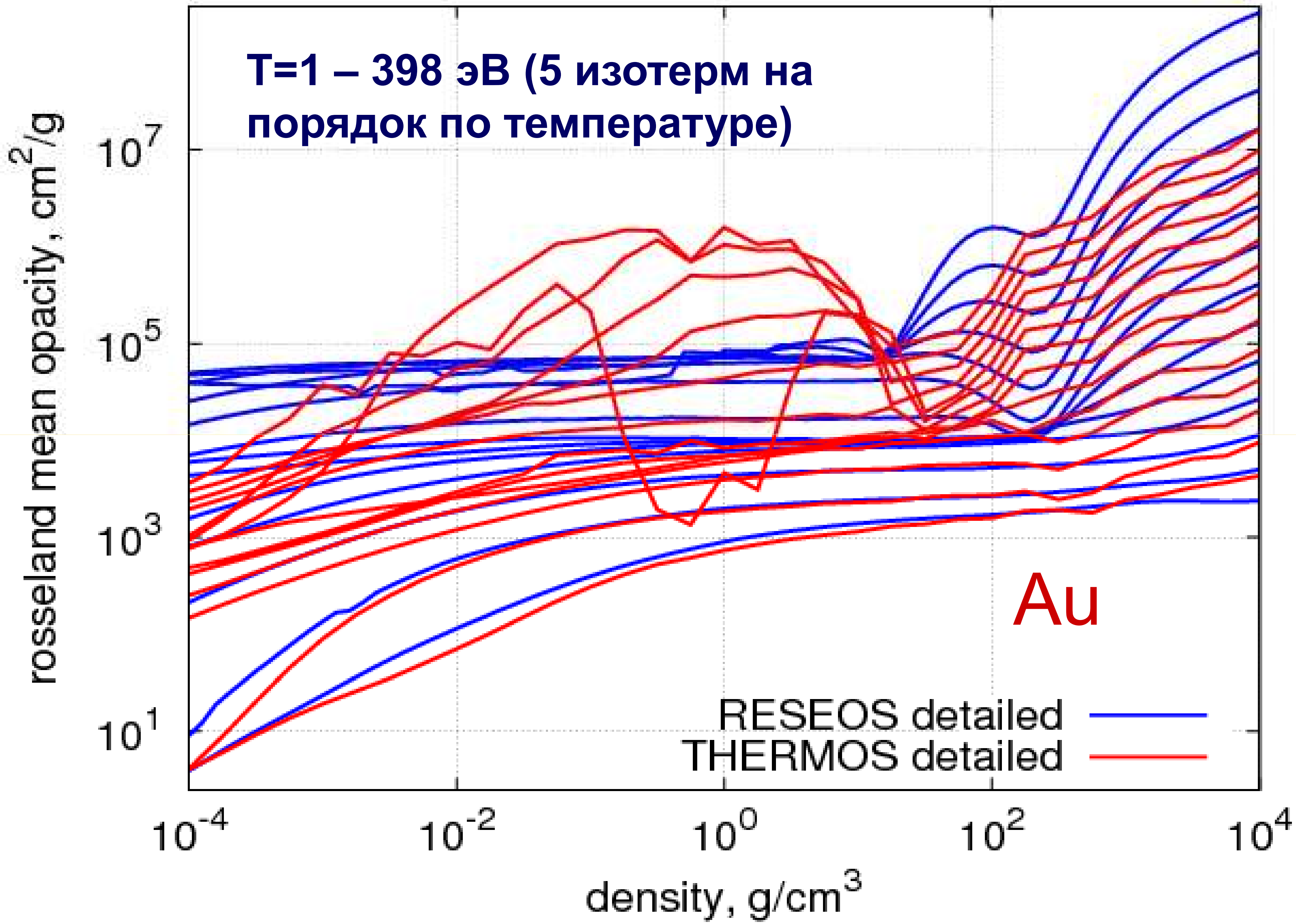
Росселандов коэффициент поглощения



Росселандов коэффициент поглощения



Росселандов коэффициент поглощения



Заключение и направления дальнейшей работы

- Создана версия программы RESEOS (в скалярном и многопроцессорном вариантах), позволяющая вычислять уравнения состояния и пробеги излучения по модели Либермана в широком диапазоне температур и плотностей.

- Пробеги излучения вычисляются с использованием как эффективной, так и детальной методики учёта ионных состояний в плазме.

- При высоких температурах результаты расчётов хорошо согласуются с результатами по программам THERMOS, Spectr_STA, TH_BAND, STA, EOSTA, при низких температурах есть расхождения в результатах.

- Следует усовершенствовать алгоритм разбиения состояний дискретного спектра на супероболочки и уточнить алгоритм расчёта сечений переходов между состояниями непрерывного спектра при наличии резонансов.

- В дальнейшем необходимо учесть статистическое уширение, связанное с мультиплетной структурой уровней энергии (например, в приближении Мошковского).

Спасибо за внимание!