

# Моделирование экспериментов по исследованию спектральных пробегов рентгеновского излучения на лазерной установке «Искра-5»

С.А.Бельков, О.О.Шаров

*Описана усовершенствованная слэтеровская модель среднего иона, используемая при расчетно-теоретическом анализе экспериментальных данных, которые были получены при исследовании спектральных пробегов рентгеновского излучения, ведущихся в РФЯЦ-ВНИИЭФ на лазерной установке «Искра-5». Предлагаемая модель позволяет определять спектральные характеристики рентгеновского излучения с точностью до единиц электронвольт. Приведены результаты моделирования экспериментов с нагретыми рентгеновским излучением алюминиевыми и германиевыми образцами с начальной толщиной  $\sim 0.1$  мкм, в которых зарегистрированы линии поглощения  $1s-2p$ -переходов в Al и полоса поглощения  $2p-3d$ -переходов в Ge.*

**Ключевые слова:** лазерная плазма, рентгеновская спектроскопия поглощения, пробеги рентгеновского излучения, слэтеровская модель среднего иона.

## 1. Введение

Определение пробегов рентгеновского излучения в горячем веществе является одним из вопросов физики плазмы, широко изучаемых теоретически и экспериментально. Особый интерес для понимания того, как использовать мишени в лазерном термоядерном синтезе и в других исследованиях по физике высоких плотностей энергии, представляет интервал температур 50–100 эВ. Для теоретического моделирования пробегов рентгеновского излучения при таких температурах требуется знать детальную структуру атомов и форму спектральных линий, а также учитывать многочастичные взаимодействия в плазме. Сложность подобных расчетов приводит к необходимости экспериментальной проверки ряда упрощающих предположений, которые используются в существующих расчетно-теоретических моделях. Экспериментальные исследования пробегов рентгеновского излучения в нагретом веществе, таким образом, представляют не только самостоятельный интерес, но и позволяют совершенствовать расчетные модели, обеспечивая тем самым возможность оценки пробегов в более широком, не охваченном экспериментами диапазоне параметров. В последние годы экспериментальные исследования пробегов излучения в нагретом веществе с использованием мощных лазерных установок активно ведутся во многих лабораториях мира [1–5]. В РФЯЦ-ВНИИЭФ такие исследования проводятся на лазерной установке «Искра-5» [6].

Важными особенностями получаемой в экспериментах лазерной плазмы являются малое время жизни и незначительная оптическая толщина, вследствие чего приближение локального термодинамического равновесия непри-

менимо для описания ее излучающих свойств. Последнее обстоятельство стимулировало развитие кинетических подходов к описанию процессов ионизации в плазме. Решение кинетических уравнений в рамках модели химической связи, рассматривающей эволюцию распределения ионов с разными наборами чисел заполнения электронных оболочек, сталкивается с существенными вычислительными трудностями, связанными с большой размерностью системы уравнений. Для преодоления этих трудностей используются модели, в которых вся совокупность ионов в возбужденных и ионизованных состояниях заменяется единственным «средним» ионом, населенности оболочек которого равны средним населенностям оболочек всего распределения.

Среди различных моделей расчета атомных характеристик среднего иона можно выделить класс слэтеровских моделей. Слэтеровские модели иона неплохо передают основные спектральные особенности излучения многозарядной плазмы. Они обладают значительной универсальностью, позволяя рассчитывать спектральные характеристики плазмы и в условиях локального термодинамического равновесия, и в его отсутствие. Кроме того, эти модели достаточно просты, что дает возможность использовать их при численном моделировании излучающей неравновесной и нестационарной плазмы в программах радиационной газовой динамики.

Настоящая статья посвящена моделированию на основе используемой во ВНИИЭФ модификации слэтеровской модели среднего иона экспериментов по измерению спектральных пробегов рентгеновского излучения в нагретых алюминии и германии, выполненных на установке «Искра-5». Расчетно-теоретический анализ экспериментов проводился с помощью одномерной программы газовой динамики (СНДП), в которой учитывается поглощение лазерного излучения, движение плазмы в двухтемпературном приближении, электронная и ионная теплопроводности с релаксацией температуры электронов и ионов, спектральный перенос неравновесного излучения в диффузионном приближении и кинетика ионизации в приближении среднего иона [7, 8].

С.А.Бельков, О.О.Шаров. Российский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ, Россия, Нижегородская обл., 607188 Саров, просп. Мира, 37; e-mail: belkov@otd13vniief.ru, rvtt@runbox.com

Поступила в редакцию 3 мая 2011 г., после доработки – 11 августа 2011 г..

## 2. Модель среднего иона

Энергия изолированного иона складывается из трех частей: кинетической энергии связанных электронов  $T$ , энергии взаимодействия электронов с ядром  $V_n$  и энергии взаимодействия электронов друг с другом  $V_{ee}$ . Для энергии иона с электронной конфигурацией

$$\{C\} = \prod_k q_k^{P_k} = \{q_1^{P_1}, q_2^{P_2}, \dots, q_k^{P_k}, \dots\},$$

где  $q_k$  – набор квантовых чисел  $k$ -й электронной оболочки, а  $P_k$  – ее населенность, слэтеровская модель дает следующее выражение (в атомных единицах) [9]:

$$E = T + V_n + V_{ee} = \sum_k P_k \frac{Z_k^2}{2n_k^2} - \sum_k P_k \frac{Z_k}{n_k} Z + V_{ee}. \quad (1)$$

Здесь  $Z_k$  – эффективный заряд ядра для электронов на  $k$ -й оболочке;  $n_k$  – главное квантовое число оболочки;  $Z$  – заряд ядра иона.

Энергия взаимодействия электронов друг с другом  $V_{ee}$  – это сумма энергии Хартри  $V_H$  и энергии обменно-корреляционного взаимодействия  $V_{xc}$ :

$$\begin{aligned} V_{ee} &= V_H + V_{xc} = \frac{1}{2} \sum_{k,k'} P_k P_{k'} \{k, k'\} - \frac{1}{2} \sum_k P_k^2 \{k, k\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,k'} P_k (P_{k'} - \delta_{kk'}) \{k, k'\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\delta_{kk'}$  – символ Кронекера;  $\{k, k'\}$  – линейная комбинация слэтеровских интегралов [10].

Эффективные заряды ядра находятся из условия минимума полной энергии иона и вычисляются по формуле

$$Z_k = Z - \sum_{k'} \sigma_{kk'} (P_{k'} - \delta_{kk'}), \quad (3)$$

где  $\sigma_{kk'}$  – универсальная матрица экранировочных констант.

Энергия связи электрона  $\epsilon_k$  рассчитывается как разность энергий иона с электроном и без него:

$$\epsilon_k = E\{C\} - E\{C'\}, \quad (4)$$

где

$$C' = \prod_{k'} q_k^{P_k - \delta_{kk'}}.$$

Можно показать, что с точностью до второй вариации населенности оболочки энергия связи электрона аппроксимируется производной полной энергии иона по соответствующей населенности,

$$\epsilon_k = \left. \frac{\partial E}{\partial P_k} \right|_{1/2}, \quad (5)$$

где производная  $\partial E / \partial P_k$  вычисляется в точке  $\prod_{k'} q_k^{P_k - \delta_{kk'}/2}$  (производная «в 1/2»). Точность аппроксимации равна  $\sigma_{kk}^2 / (8n_k^2) \delta P^2$  и составляет доли электронвольта. Аналогично разность

$$\epsilon_{ij} = \left. \frac{\partial E}{\partial P_j} \right|_{1/2} - \left. \frac{\partial E}{\partial P_i} \right|_{1/2} \quad (6)$$

соответствует энергии одноэлектронного перехода с точностью не хуже долей электронвольта. Последнее выражение существенно упрощает вычисления, позволяя не пересчитывать энергию иона в конечном состоянии для каждого перехода, а воспользоваться энергиями связи (5).

Символ Кронекера в формуле (3) для эффективного заряда тот же, что в выражении (2) для энергии электрон-электронного взаимодействия  $V_{ee}$ : он отвечает за поправку на лишний кулоновский вклад в самосогласованное поле от рассматриваемого электрона и введен для учета обменно-корреляционной дырки [11]. Согласно нашим расчетам, использование формулы (3) смещает линии поглощения в жесткую область по сравнению с экспериментом. Для того чтобы избежать этого, в (3) был введен зависящий от атомного номера элемента коэффициент  $\alpha(Z)$ , величина которого подбиралась такой, чтобы расчетное положение максимума линий поглощения наилучшим образом совпадало с экспериментальным:

$$Z_k = Z - \sum_{k'} \sigma_{kk'} (P_{k'} - \alpha(Z) \delta_{kk'}). \quad (7)$$

За основу набора экранировочных констант была взята матрица  $\sigma^F$ , предложенная G.Faussurier и др. в работах [9,12] и учитывающая расщепление уровней энергии электронов по орбитальному квантовому числу  $l$ . Количество электронных оболочек, а значит и число уравнений кинетики ионизации, растет с увеличением максимального главного квантового числа  $n_{\max}$  как  $n_{\max}(n_{\max} + 1)/2$ . Вместе с тем  $l$ -расщепление внешних ( $n > 6$ ) уровней составляет не более нескольких процентов от межуровневого расстояния даже для таких элементов, как свинец, а это означает, что для внешних оболочек можно воспользоваться моделью без расщепления по орбитальному квантовому числу. Матрица вырожденных по  $l$  экранировочных констант  $\sigma^M$  для уровней с главным квантовым числом до 10 включительно была представлена R.M.More в [13]. Дополнив внутреннюю часть матрицы  $\sigma^F$  значениями  $\sigma^M$ , получим матрицу  $\sigma_{kk'}$ , где символы  $k$  и  $k'$  теперь означают либо комбинацию квантовых чисел  $nl$ , либо только главное квантовое число.

Матрица экранировочных констант  $\sigma^F$  получена в результате согласования расчетов энергетической структуры ионов по слэтеровской модели с расчетами по нерелятивистской модели Хартри–Фока. Для тяжелых элементов необходим учет релятивистских эффектов, которые вводились как поправки к рассчитанным с помощью экранировочной матрицы энергиям связи  $\epsilon_k \rightarrow \epsilon_k + \delta\epsilon_k^{\text{rel}}$ :

$$\delta\epsilon_k^{\text{rel}} = \epsilon_k^{\text{rel}} - \frac{1}{\alpha^2} + \frac{Z_k^2}{2n_k^2}, \quad (8)$$

где  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры;

$$\epsilon_k^{\text{rel}} = \frac{1}{\alpha^2} \left\{ 1 + \frac{(Z_k \alpha)^2}{\left[ \sqrt{\kappa_k^2 - (Z_k \alpha)^2} + n_{rk} \right]^2} \right\}^{-1/2} \quad (9)$$

– релятивистский уровень энергии электрона в кулоновском поле ядра с зарядом  $Z_k$  [14];  $|\kappa_k| = j_k + 1/2$ ;  $j_k$  – полный момент электрона;  $n_{rk} = n_k - |\kappa_k|$ .

Релятивистские поправки можно учитывать при решении уравнений кинетики ионизации, однако их величина много меньше расстояния между уровнями с разными  $l$ , а число уравнений при таком расчете увеличивается до  $n_{\max}^2$ . Это явилось причиной того, что поправки определялись лишь при детальном расчете спектров пропускания рентгеновского излучения образцом после решения дифференциальных уравнений кинетики.

Взаимодействие с окружающими ионами в плазме влияет на энергию связанных состояний и приводит к снятию вырождения электронных оболочек и переходу части связанных состояний в область непрерывного спектра. Снятие вырождения моделировалось введением зависимости статистического веса оболочек от плотности плазмы

$$D_k = \frac{D_k^0}{1 + a(R_k/R_0)^b}, \quad (10)$$

где  $D_k^0$  – статистический вес оболочки изолированного иона;  $R_k = n_k^{3/2} \sqrt{l_k + 1/2}/Z_k$  – радиус  $k$ -й электронной оболочки;  $R_0$  – радиус ионной сферы;  $a, b$  – константы, полученные из условия наилучшего согласия с моделями, учитывающими влияние окружения из первых принципов. Значения констант  $a$  и  $b$  для разных элементов и методика их вычисления приведены в работе [15]. Снижение потенциала ионизации определяется корреляционной энергией кулоновского взаимодействия ионов  $E^{ci}$ :

$$\delta \epsilon^{ci} = - \frac{\partial E^{ci}}{\partial \langle Z \rangle}, \quad (11)$$

где  $\langle Z \rangle$  – средний заряд иона. Методика расчета энергии взаимодействия ионов также описана в [15].

В результате решения уравнений кинетики ионизации среднего иона получаются в общем случае дробные значения средних населенностей электронных оболочек. Коэффициенты поглощения рентгеновского излучения можно рассчитывать непосредственно по средним населенностям оболочек, но при этом необходимо учитывать статистическое уширение уровней энергии, определяемое термодинамическими флуктуациями чисел заполнения оболочек. Статистическое уширение по порядку величины соответствует производной энергии связи электрона по населенности уровня и в типичных условиях экспериментов с лазерной плазмой (температура 0.1 кэВ, плотность 0.1 г/см<sup>3</sup>) составляет несколько процентов от энергии связи. Для энергий  $\sim 1$  кэВ это десятки электронвольт, и получающиеся линии поглощения оказываются огибающими линий, соответствующих отдельным электронным конфигурациям. Такой расчет не дает возможности различить пики поглощения, соответствующие ионам с разными зарядами, поэтому в работе восстанавливалось распределение ионов с целочисленными населенностями оболочек. Электроны при этом считались независимыми, и вероятность реализации определенной конфигурации вычислялась как произведение одноэлектронных вероятностей. Считалось также, что вероятность нахождения на  $k$ -й оболочке  $m$  электронов подчиняется биномиальному закону [16]

$$f_k^m = \binom{D_k}{m} p_k^m (1 - p_k)^{D_k - m}, \quad (12)$$

где  $D_k$  – статистический вес оболочки;  $p_k = P_k/D_k$  – степень заполнения оболочки.

При вычислении спектрального коэффициента поглощения учитывались: фотопоглощение по формуле Крамерса с фактором Гаунта из [17], поглощение в линиях [18], тормозное поглощение по формуле Крамерса с усредненным по температуре фактором Гаунта в приближении Борна–Эльверта [19] и комптоновское рассеяние [14].

### 3. Моделирование экспериментов

Экспериментальное исследование пробегов рентгеновского излучения (РИ) в нагретом веществе на установке «Искра-5» проводилось методом точечной спектроскопии поглощения. В первых экспериментах на этой установке для нагрева образцов использовалось излучение одного из ее каналов. Мы рассмотрим одноканальный эксперимент, в котором использовался алюминиевый образец с начальной толщиной 0.15 мкм. Схема мишенной сборки, детали постановки эксперимента, а также его результаты приведены в [6]. При анализе эксперимента рассчитывался поток рентгеновского излучения, выходящий из конвертора, а затем определялась динамика нагрева образца полученным рентгеновским излучением. В качестве граничного условия по падающему излучению на поверхности образца задавался планковский спектр с температурой, определяемой интенсивностью РИ конвертора.

В эксперименте образец разлетается, не успев прогреться: различие температур в различных точках по толщине образца в момент максимума рентгеновского импульса достигает двух раз, плотности – шести раз. Максимальная температура плазмы составляет 25 эВ, средняя плотность близка к 0.1 г/см<sup>3</sup>. Расчетное пропускание неплохо совпадает с экспериментально зарегистрированным (рис.1).

Количества мягкого рентгеновского излучения, воздействующего на исследуемый образец в одноканальных экспериментах, недостаточно, чтобы нагреть его до значительных температур, поэтому был разработан эксперимент с использованием для формирования греющего рентгеновского излучения четырех каналов установки «Искра-5». В первых многоканальных экспериментах осуществлялся односторонний нагрев образцов, а в дальнейшем были изготовлены мишени с двусторонним нагревом. Геометрия мишенной сборки описана в [6]. Во всех экспериментах она была одинаковой, варьировались лишь толщина ис-

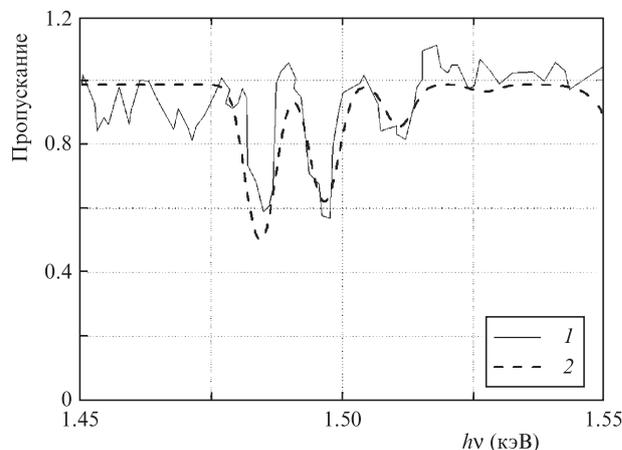


Рис.1. Спектр пропускания плазмы алюминиевого образца толщиной 0.15 мкм в одноканальном эксперименте (1) и в расчете (2).

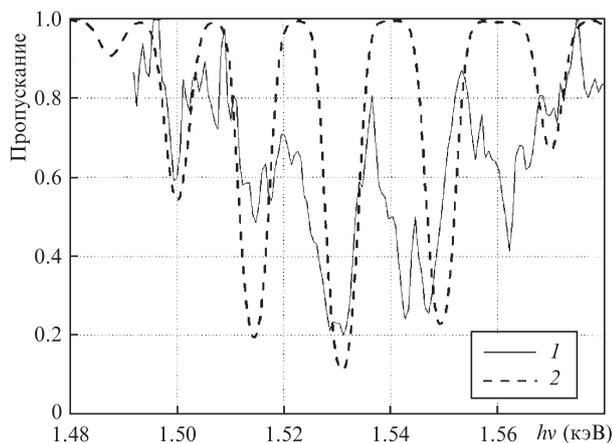


Рис.2. Спектр пропускания плазмы алюминиевого образца толщиной 0.1 мкм в эксперименте с односторонним нагревом (1) и в расчете (2).

следуемого образца, форма лазерного импульса и задержка импульса просветки.

Как показывают расчеты, в четырехканальных экспериментах с односторонним нагревом образцы разогреваются заметно более равномерно, чем в одноканальных экспериментах. Неоднородность распределения температуры и плотности составляет около 10%. Пропускание образца из алюминия с начальной толщиной 0.1 мкм в одном из таких экспериментов в момент максимума рентгеновского импульса изображено на рис.2. В эксперименте энергия лазерного излучения, введенного в бокс-конвертор, была равна 700 Дж, длительность импульса – 0.5 нс, задержка рентгеновского импульса – 0.75 нс. Средняя расчетная температура образца в момент максимума рентгеновского импульса составила 45 эВ, плотность – 0.023 г/см<sup>3</sup>.

В экспериментах с двусторонним нагревом образцов исследовались пробеги излучения в алюминиевых образцах толщиной 0.09 и 0.11 мкм и в германиевом образце толщиной 0.14 мкм. Суммарная энергия лазерного излучения в экспериментах с образцами из алюминия была равна 700 и 900 Дж соответственно, из германия – 900 Дж. Длительность импульсов в каналах составляла 0.32–0.38 нс и 0.48–0.93 нс для алюминия и 0.60–0.75 нс для германия. Задержка рентгеновского импульса была равна 0.75, 0.7 и 0.6 нс. Полученные в экспериментах с алюминием спектры приведены на рис.3. Спектрометр в эксперименте с образцом толщиной 0.11 мкм имел лучшее разрешение, чем в эксперименте с образцом толщиной 0.09 мкм, и спектр на рис.3,б содержит больше деталей, чем спектр на рис.3,а. Видно, что экспериментальные данные моделируются в расчете с удовлетворительной точностью. Расчет пропускания германия (рис.4, кривая 2), также неплохо описывает положение линий 2р–3d-перехода (область от 1.20 до 1.25 кэВ) и абсолютную величину поглощения в них.

На всех представленных расчетных спектрах изображено пропускание в момент максимума рентгеновского импульса, но длительность зондирующих импульсов в экспериментах была сравнима с длительностью греющих рентгеновских импульсов и с временем задержки зондирующих импульсов. Для того чтобы выявить влияние конечности длительности рентгеновского импульса на результаты определения спектров, был выполнен учитывающий ее расчет.

На рис.4 приведена расчетная величина пропускания плазмы в эксперименте с германиевым образцом, усред-

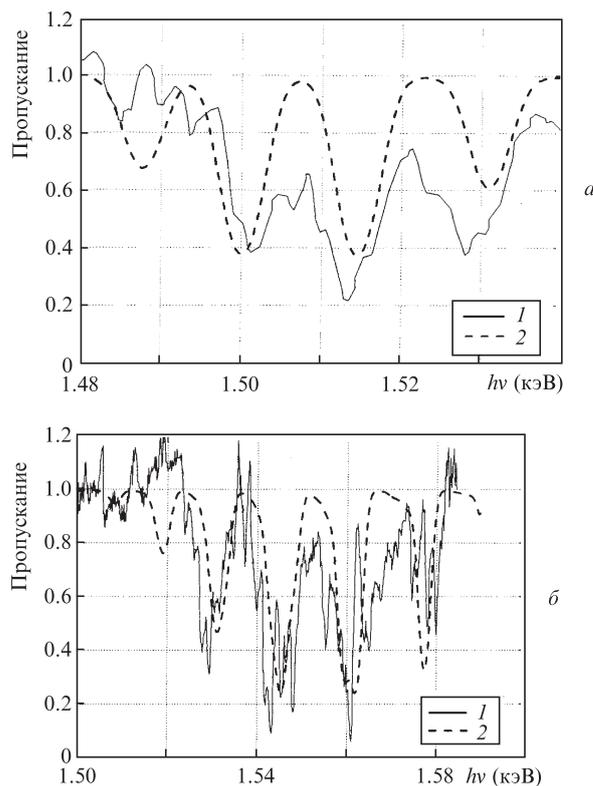


Рис.3. Спектр пропускания плазмы алюминиевых образцов толщиной 0.09 мкм (а) и 0.11 мкм (б) в экспериментах с двусторонним нагревом (1) и в расчетах (2).

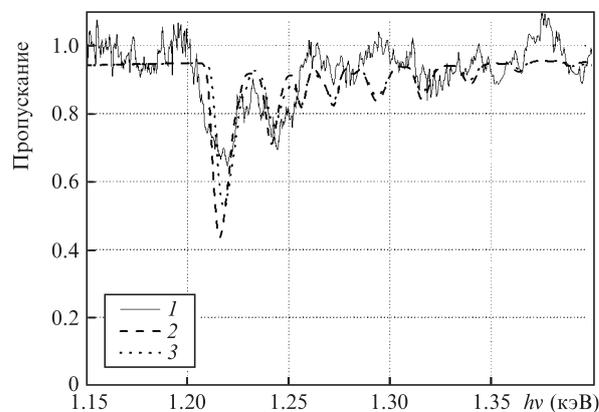


Рис.4. Спектр пропускания плазмы германиевого образца толщиной 0.14 мкм в эксперименте с двусторонним нагревом (1), в расчете в момент максимума рентгеновского импульса (2) и в расчете, усредненном по длительности рентгеновского импульса (3).

ненная по длительности рентгеновского импульса, равной 0.72 нс. Видно, что учет конечной ширины импульса не оказывает заметного влияния на результат. Пропускание в линиях несколько увеличилось, и расчетная зависимость приблизилась к экспериментальной, но эти изменения незначительны.

#### 4. Заключение

В статье предложен способ учета обменно-корреляционного взаимодействия электронов в модели среднего иона, позволяющий определять спектральные характеристики излучения с точностью до единиц электронвольт, для чего в экранировочную матрицу введен дополнитель-

ный параметр, зависящий от атомного номера элемента. В модели реализован возможный способ восстановления распределения ионов с целочисленными населенностями электронных оболочек, для чего использовалась информация о средних населенностях оболочек. Это позволило разрешить спектральные линии поглощения, соответствующие ионам с разным зарядом, для внутренних переходов в Al и Ge. Приведены результаты расчетов спектров пропускания рентгеновского излучения в одно- и четырехканальных экспериментах по исследованию непрозрачности с образцами толщиной порядка 0.1 мкм, и продемонстрировано, что эти эксперименты удовлетворительно описываются в рамках предложенной модели. Разработанную модель предполагается в дальнейшем использовать для описания процессов, происходящих в мишенях для лазерного термоядерного синтеза.

Авторы признательны Н.А.Суслову за предоставленный экспериментальный материал.

1. Foster J.M., Hoarty D.J., Smith C.C., et al. *Phys. Rev. Lett.*, **67** (23), 3255 (1991).
2. Eidmann K., Schwanda W., Foldes I.B., et al. *J. Quantum Spectr. Radiat. Transfer*, **51** (1/2), 77 (1994).
3. Perry T.S., Budil K.S., Cauble R., et al. *J. Quantum Spectr. Radiat. Transfer*, **54** (1/2), 317 (1995).
4. Chenais-Popovics C., Gilleron F., Fajardo M., et al. *J. Quantum Spectr. Radiat. Transfer*, **65**, 117 (2000).
5. Jiamin Yang, Yaonan Ding, Jun Yan, et al. *Phys. Plasmas*, **9** (2), 678 (2002).
6. Бондаренко С.В., Гаранин Р.В., Жидков Н.В. и др. *Квантовая электроника* (в печати).
7. Бельков С.А., Долголева Г.В. *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Мат. модел. физ. процессов*, **1**, 59 (1992).
8. Бельков С.А., Гаспарян П.Д., Кочубей Ю.К., Митрофанов Е.И. *ЖЭТФ*, **111** (2), 495 (1997).
9. Faussurier G., Blancard C., Decoster A. *J. Quantum Spectr. Radiat. Transfer*, **58** (2), 233 (1997).
10. Сובельман И.И. *Введение в теорию атомных спектров* (М.: Физматгиз, 1963).
11. [http://cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis\\_ppr/](http://cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis_ppr/).
12. Fassurier G., Blancard C., Renaudin P. *High Energy Density Phys.*, **4**, 114 (2008).
13. More R.M. *J. Quantum Spectr. Radiat. Transfer*, **27**, 345 (1982).
14. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Квантовая электродинамика* (М.: Наука, 1989).
15. Бельков С.А., Бондаренко С.В., Митрофанов Е.И. *Квантовая электроника*, **30**, 963 (2000).
16. Takabe H., Nishikawa T. *J. Quantum Spectr. Radiat. Transfer*, **51** (1/2), 379 (1994).
17. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений* (М.: Наука, 1966).
18. Itoh M., Yabe T., Kiyokawa S. *Phys. Rev. A*, **35**, 233 (1987).
19. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния* (М.: Физматлит, 2000).