На правах рукописи

Леонтьев Дмитрий Сергеевич

СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАДИАЦИОННО-СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В ТЕРМОЯДЕРНОЙ ПЛАЗМЕ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Специальность 1.3.9. – физика плазмы

Москва
2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»).

Научный руководитель:	**Лисица Валерий Степанович** доктор физико-математических наук, профессор, начальник лаборатории теории излучения отдела теории плазмы Курчатовского комплекса термоядерной энергетики и плазменных технологий НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва.
Официальные оппоненты:	**Виноградов Александр Владимирович** доктор физико-математических наук, профессор, высококвалифицированный главный научный сотрудник Лаборатории рентгеновской оптики ФИАН, г. Москва;
	Шапиро Давид Абрамович доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией фотоники ИАиЭ СО РАН, г. Новосибирск.
Ведущая организация:	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, г. Москва.

Защита диссертации состоится «08» декабря 2021 г., начало в 16.30, на заседании диссертационного совета 02.1.003.02 на базе Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» по адресу: 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский институт» и на сайте www.nrcki.ru.

Автореферат диссертации разослан « __ » __________ 2021 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 02.1.003.02,
кандидат физико-математических наук Ю.В. Капустин

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы

Актуальность расчетов радиационно-столкновительных процессов с тяжелыми многоэлектронными ионами обусловлена использованием тяжелых элементов, в первую очередь вольфрама, в современных термоядерных установках, в том числе в конструкции будущего термоядерного реактора ИТЭР. При взаимодействии плазмы с пластинами дивертора, сделанными из вольфрама, происходит накопление тяжелых примесей в разряде. Присутствие в плазменном шнуре тяжелых примесей существенно влияет на энергобаланс плазмы вследствие высокой излучательной способности, поскольку даже при больших электронных температурах ионы этих примесей будут содержать большое число связанных электронов. Кроме того, данный эффект имеет тенденцию усиливаться в результате наблюдаемой в экспериментах аккумуляции тяжелых примесей [1]. Помимо этого, накопление вольфрама в центре плазменного шнура в H-режиме может приводить к потере устойчивости из-за развития МГД процессов, переходу в L-моду, срыву разряда. Поэтому важно проводить постоянный мониторинг плазмы, в частности следить за содержанием ионов тяжелых примесей в плазме. Для определения ионизационного баланса необходимо рассчитать скорости радиационно-столкновительных процессов, что является весьма нетривиальной задачей в случае многоэлектронных ионов. Существующие численные коды, восходящие к работам Кована [2], весьма громоздки и требуют значительного времени для расчета спектров излучения многоэлектронных ионов. Кроме того, точность расчетов по этим кодам достаточно ограничена [2] и для их верификации всегда требуется привлечение экспериментальных данных.

С точки зрения атомной физики ионы вольфрама выделяются среди всех других примесей в плазме, чрезвычайной сложностью атомной структуры и диапазоном возможных изменений заряда (75 возможных зарядовых состояний). При этом диапазон изменения плазменных параметров (особенно температуры) оказывается чрезвычайно широким: от 1 эВ в пристеночной плазме до 20-30 кэВ в центре плазменного шнура. Это обстоятельство требует развития теоретических моделей расчета атомных процессов в широком диапазоне электронной температуры плазмы. В данной работе в качестве такого метода расчета использованы статистические модели многоэлектронных ионов. Такой метод позволяет получить универсальные результаты для различных атомных процессов (например, диэлектронной рекомбинации, возбуждения электронами, ионизации) в виде достаточно простых функционалов от распределения электронной плотности (например, распределения Томаса-Ферми [3,4]) в многоэлектронных ионах. Первые расчеты процессов фотоионизации, основанные на модели локальной плазменной частоты (ЛПЧ), были проведены Брандтом и Лундквистом [5]. Обоснование плазменной модели атома на основе решения уравнения Власова для томас-фермиевского атома было дано Виноградовым и Толстихиным [6]. В данной работе статистические методы расчета применены к широкому кругу атомных процессов, ответственных за излучение плазмы с тяжелыми примесями.

Основным каналом рекомбинации тяжелых ионов является диэлектронная рекомбинация, включающая процессы электронного захвата, автоионизации и радиационной релаксации. Результаты расчетов в статистических моделях скоростей диэлектронной рекомбинации наряду со скоростями ионизации необходимы для определения ионизационного равновесия ионов в плазме.

Важной характеристикой плазмы являются радиационные потери энергии на примесях, вызванные возбуждением ионов примеси электронами, приводящие к остыванию плазмы. Однако, тяжелые примеси, в первую очередь вольфрам, сохраняют достаточно большое число связанных электронов даже при температурах, близких к поджигу термоядерной реакции. Это приводит к появлению нового канала радиационных потерь, связанного с возбуждением примесей не только электронами, но и ионами основной плазмы. В частности, возможно прямое возбуждение примесей альфа-частицами, приводящее к их радиационным потерям энергии на связанных электронах тяжелых ионов. Обычная схема релаксации энергии альфа-частиц связана с их упругими столкновениями со свободными электронами плазмы, которые затем теряют энергию на возбуждение и теплопроводность примесей. Оценка прямого канала радиационных потерь альфа-частиц на тяжелых ионах представляет общефизический интерес. Расчет скоростей возбуждения многоэлектронных ионов примеси ионами плазмы является многоконфигурационной задачей теории столкновений, достаточно сложной даже для простейших двухуровневых систем. Использование статистических методов позволяет упростить расчеты и резко (на порядки величин) сократить расчетное время, дать разумные оценки этих эффектов.

У тяжелых элементов неоднократно наблюдались массивы линий, соответствующих радиационным переходам от всех представленных в зарядовом распределении ионов, образующие квазинепрерывный спектр излучения, называемый «квазиконтинуум». В частности, для исследования транспорта вольфрама в современных термоядерных установках нужно исследовать возбуждение и интенсивность высвечивания как отдельных линий, так и массивов линий. Поэтому актуальной задачей является описание распределения радиационных потерь энергии по частотам или длинам волн радиационных переходов в ионах примеси. Такие переходы происходят в пределах одной электронной оболочки и имеют сложную структуру, возникающую от множества переходов между близкими атомными состояниями, образующих квазинепрерывный спектр, сосредоточенный в узком диапазоне длин волн 2-8 нм и имеющий характерный профиль, обрывающийся в области малых длин волн. Расчет большого числа переходов представляет собой весьма трудоемкую задачу, поэтому разумно использовать статистическую модель и рассматривать возбуждение переходов как коллективные возбуждения атомной оболочки с частотами и интенсивностями, задаваемые статистически через распределение плотности электронов в атоме, что позволяет получить огибающие спектров массива радиационных переходов.

Цели и задачи исследования

-

- ть д ли для т ти ди л т и ии т ти ти т ии т
- ть и л ый под, провести численные расчеты с оростей ди л т и ии для яд л т и ли и и и л т и тестирование расчетов путем ия д и более детальных квантовомеханических кодов.
- ть новый анал радиа ионны потерь (радиа ионные т и т ль -частиц на тяжелых примесях) и сравнить и с ди и и т я и л т т яд л
- Провести исследование спе тральны радиа ионны потерь (ва и онтинуума) тя л л т т ти ль л ия т яд л и сравнить с спериментальными данными, полученными на современных термоядерных т .
- ить спе тральное распределение вероятностей переходов т и л т тя л и и сравнить о и а ие т льт т и т .

Методы исследования

Радиационно-столкновительные процессы в плазме с участием тяжелых ионов рассматриваются в различных статистических моделях с использованием непрерывных пространственных распределений плотности электронов внутри иона, в частности распределения Томаса-Ферми. Для расчетов характеристик процессов в данной работе используются авторские коды. Все численные расчеты выполнены на языке программирования Python 2.7 с использованием дополнительных библиотек NumPy и SciPy.

Научная новизна результатов проведенных исследований

- Впервые получены аналитические выражения для расчета радиационно-столкновительных процессов, рассматриваемых в работе. Сравнение предварительных оценок, выполненных по этим выражениям, показало согласие с численными методами по порядку величины.

- Впервые статистическая модель применена для расчета скорости диэлектронной рекомбинации тяжелых ионов.

- Рассмотрен новый канал радиационных потерь быстрых частиц: альфа-частиц, дейтронов и тритонов. Потери рассчитаны в рамках статистической и столкновительной (кулон-борновском приближении) моделей.

- Впервые выполнено моделирование квазиконтинуума тяжелых ионов в термоядерной плазме в рамках статистической модели, получены огибающие величин вероятностей радиационных переходов в ионах.

Практическая значимость результатов проведенных исследований

- Построенная статистическая модель расчета скорости диэлектронной рекомбинации тяжелых ионов занимает меньшее на порядки величин время по сравнению с поуровневыми кодами. При этом результаты расчетов по статистическим моделям попадают в интервал разброса данных поуровневых кодов между собой. В этом смысле точность статистической теории не отличается от точности апробированных квантово-механических кодов. Это открывает возможности быстрого расчета ионизационного равновесия примесей в термоядерной плазме, пригодного для экспресс-анализа работы современных термоядерных установок.

- Произведен расчет нового канала радиационных потерь быстрых альфа-частиц и изотопов водорода на тяжелых ионах. Показано, что радиационные потери быстрых ионов на тяжелых ионах примесей в плазме могут быть сравнимы с потерями электронов.

- Разработанный метод моделирования квазиконтинуума тяжелых ионов пригоден к использованию для диагностики и мониторинга содержания тяжелых примесей в плазменном шнуре.

Степень достоверности результатов проведенных исследований

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе, обусловлена строгостью проделанных аналитических и численных расчётов. Она подтверждается предельным переходом к ранее известным результатам, полученными другими авторами. Результаты численных расчётов, полученных с помощью авторского компьютерного кода, верифицированы на модельных задачах, допускающих точные аналитические решения.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту

- Статистическая модель расчета скорости диэлектронной рекомбинации тяжелых ионов в горячей плазме.

- Численный код на основе статистической модели и результаты сравнения статистической модели с результатами поуровневых расчетов скорости диэлектронной рекомбинации, подтверждающее достаточно высокую точность развитой модели.

- Расчет нового канала радиационных потерь альфа-частиц, дейтронов и тритонов на тяжелых ионах на основе статистических моделей возбуждения многоэлектронных ионов тяжелыми частицами.

- Статистическая модель квазиконтинуума тяжелых ионов и обоснование характерной формы их спектров, связанной с обрывом в области малых длин волн. Сравнение расчетов для серии ионных спектров ряда тяжелых элементов (гадолиния, вольфрама, золота, свинца) с экспериментами на современных термоядерных установках таких как LHD и TEXT.

- Расчеты огибающих квазиконтинуума для ряда электронных конфигураций многоэлектронных ионов. Сравнение с результатами поуровневых расчетов.

Личный вклад автора

Автор лично проводил все расчеты с помощью самостоятельно написанных кодов, использующих статистическую модель. Также он обрабатывал и интерпретировал результаты, которые легли в основу представленной работы. Постановка задач проводились автором совместно с научным руководителем и научной группой (Лисицей В.С., Демурой А.В. и Шурыгиным В.А.)

Апробация работы

Основные результаты работы неоднократно докладывались и обсуждались на тематическом семинаре «Теория магнитного удержания плазмы» в НИЦ «Курчатовский институт», а также на 14 международных и всероссийских научных конференциях и молодежных школах, таких как XLIII, XLIV, XLV, XLVI, XLVII, XLVIII Международные Звенигородские конференции по физике плазмы и УТС (Звенигород, 2016,2017, 2018, 2019, 2020, 2021), XXV Съезд по спектроскопии, (Троицк, 2016), XIV Курчатовская междисциплинарная молодежная школа (Москва, 2016), 5-я международная школа FAIR (Кастильоне дель Пискайя, Италия, 2017), X, XI и XII конференции «Современные средства диагностики плазмы и их применение» (Москва, 2016, 2018, 2020), 44-я и 46-я Международные конференции Европейского физического общества по физике плазмы (Белфаст, Великобритания, 2017; Милан, Италия, 2019).

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем

Основные научные результаты, содержащиеся в диссертации, отражены в 21 публикации, в том числе в 6 рецензируемых научных журналах и 14 материалах конференций. В качестве объекта интеллектуальной собственности зарегистрирована программа для ЭВМ.

Содержание работы

Во введении описана исследуемая в работе проблема, сформулированы основные задачи и описаны методы их решения, обоснована актуальность темы исследования. Кратко описывается важность радиационно-столкновительных процессов с участием вольфрама для термоядерных исследований в современных установках.

Первая глава посвящена обзору работ по статистическим моделям и исследованиям радиационно-столкновительных процессов в плазме с участием тяжелых ионов, таких как диэлектронная рекомбинация, возбуждение электронами и быстрыми тяжелыми частицами плазмы (альфа-частицами и изотопами водорода). Проведен обзор трудов по изучению спектров тяжелых ионов (в частности, вольфрама), полученных на различных термоядерных установках. Рассмотрены известные [6–10] статистические модели и опыт их применения для изучения процессов, протекающих в плазме. Эти модели применялись для расчетов коллективных возбуждений электронных оболочек, скорости ионизации и поляризуемости тяжелых атомов и ионов, подтверждающих эффективность статистических моделей. Анализ публикаций по исследованию диэлектронной рекомбинации с участием многозарядных ионов различных элементов показал, что существующие на данный момент численные коды дают большой разброс данных для одного и того же зарядового состояния при данной температуре, что свидетельствует об отсутствии единого общепринятого метода расчета. Проведен обзор работ, посвященных методам расчета радиационных потерь в плазме [11,12]. В стандартном подходе рассматривался только один канал радиационных потерь, связанный с возбуждением электронами примесных ионов. Наличие тяжелых многоэлектронных примесей приводит к открытию нового канала радиационных потерь, связанных со столкновениями с тяжелыми частицами плазмы. Для исследования данных процессов использовалась не только статистическая модель, но и классическое кулон-борновское приближение. Учет этого нового канала представляет общефизический интерес, связанный с радиационными потерями альфа-частиц и изотопов водорода на примесях в термоядерной плазме. При анализе работ по исследованию квазиконтинуума тяжелых ионов, полученных на термоядерных установках, были установлены общие свойства и характеристики этого участка спектра, связанные с наличием резкого обрыва со стороны коротких длин волн.

Во второй главе описан метод расчета скорости диэлектронной рекомбинации в статистической модели для тяжелых ионов, в первую очередь, ионов вольфрама. Вначале описывается статистическая модель, основанная на модели атома Томаса-Ферми, приводятся используемые электронные распределения в ионе $n(r)$. Основной идеей статистической модели является коллективный характер возбуждения электронов ионного остова. В работе использованы две модели для определения частоты радиационно-столкновительных переходов: 1) модель локальной плазменной частоты (ЛПЧ), согласно которой возбуждаемые частоты соответствуют плазменным частотам внутри иона, которые зависят от локальной плотности электронов [5]:

$\omega_p(r)=\sqrt{\frac{4\pi e^2 n(r)}{m_e}}$; 2) приближение крамерсовской электродинамики [13,14], согласно которой возбуждаемые частоты определяются изменением скорости углового вращения вблизи точки поворота классической траектории движения электрона (модель Роста [13]): $\omega_R == \frac{\hbar(L+1/2)}{mr^2}$, где L – орбитальный момент электронов в ионе. Используется связь между распределением сил осцилляторов f_{if} и электронной плотностью внутри иона согласно правилу Райхе-Куна [4,15]: $f_{if} = 4\pi\, n(r)\, r^2 dr$, где $n(r)$ – распределение электронной плотности, r – расстояние от центра ядра. Таким образом, характеристики радиационно-столкновительных процессов можно выразить через распределения электронной плотности, и, следовательно, они являются функционалами локального электронного распределения внутри иона, конкретный вид которого определятся выбором атомной модели (Томас-Фермиевской селективной и неселективной по орбитальному моменту, моделью Слэтера и др.).

Далее описывается процесс диэлектронной рекомбинации, указываются используемые в работе приближения. На основе общих представлений об определении процесса диэлектронной рекомбинации, его скоростной коэффициент был выражен в виде суммы коэффициентов ветвления, связанных с конкурирующими каналами радиационного и автоионизационного распадов дважды возбужденных состояний атомов или ионов. Скорости распадов по этим каналам выражены в терминах статистической модели. В общем виде скорость диэлектронной рекомбинации, просуммированная по главным и орбитальным квантовым числам, имеет вид

$$Q^{st}{}_{DR}(T) = 2^{11/2}\pi^{3/2}a_0^3\omega_a\left(\frac{2Ry}{T}\right)^{3/2}\frac{1}{Z_i^2}\cdot\sum_L\int_{r_{\min}(L)}^{r_{\max}(L)}dr\cdot r^2\cdot n_L(r)\cdot\left(\frac{\omega^{(L)}(r)}{\omega_a}\right)\cdot$$

$$\cdot\int_1^{\infty}dt\cdot\exp\left[-\frac{\hbar\omega^{(L)}(r)}{T}\left(1-\frac{1}{t^2}\right)\right]\cdot\left(\int_0^{l_{\max}}dl\cdot\frac{(2l+1)\cdot l\cdot G\left(\dfrac{\omega^{(L)}(r)l^3}{3\omega_a Z_i^2}\right)}{t^3+A(r,L,l)}\right), \qquad (1)$$

$$A(r,L,l) = \frac{2^{1/2}}{\pi}\left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^3\frac{1}{Z_i^3}\left(\frac{\omega_a}{\omega^{(L)}(r)}\right)^{1/2}l\cdot G\left(\frac{\omega^{(L)}(r)l^3}{3\omega_a Z_i^2}\right),$$

$$l_{\max} = t\cdot Z_i\sqrt{\frac{\omega_a}{2\omega^{(L)}(r)}}-1.$$

где $n_L(r)$, $\omega^{(L)}(r)$ – электронная плотность и плазменная частота в ионе, зависящие от выбора модели, ω_a – атомная частота, a_0 – боровский радиус, T – электронная температура, Z_i – заряд иона, l – орбитальное квантовое число захваченного электрона; $G(u) = u\left[K_{2/3}^2(u)+K_{1/3}^2(u)\right]$. $K_{1/3}(z)$, $K_{2/3}(z)$ – функции Макдональда с дробным индексом, $r_{\min}^{(L)}$, $r_{\max}^{(L)}$ – предельные значения радиуса электронного распределения, выбираемые в соответствии с расчетными моделями.

Для упрощения расчетов проведен процесс усреднения скорости автоионизационного распада по орбитальному моменту захваченного электрона. После этого были рассмотрены три частных случая статистической модели с различными электронными распределениями и зависимостями частоты от радиуса: модель Томаса-Ферми с частотой перехода, определяемой локальной плазменной частотой; модель Томаса-Ферми, селективная по орбитальному моменту ионного остова с частотами, также зависящими от орбитального момента остова; модель Томаса-Ферми, селективная по орбитальному моменту ионного остова с частотой, определяемой изменением угловой скорости вблизи точки поворота траектории электрона (частотой Роста [13,16]).

На рисунке 1 представлены результаты расчетов скорости диэлектронной рекомбинации в зависимости от электронной температуры плазмы, а также сравнение с данными численных расчетов для иона вольфрама W^{37+}. Анализ результатов показал, что статистические модели дают оценку сверху для скоростных коэффициентов диэлектронной рекомбинации, а их результаты достаточно близки к данным точных квантовомеханических расчетов. При этом из рассмотренных моделей наиболее оптимальные результаты показала статистическая модель Роста.

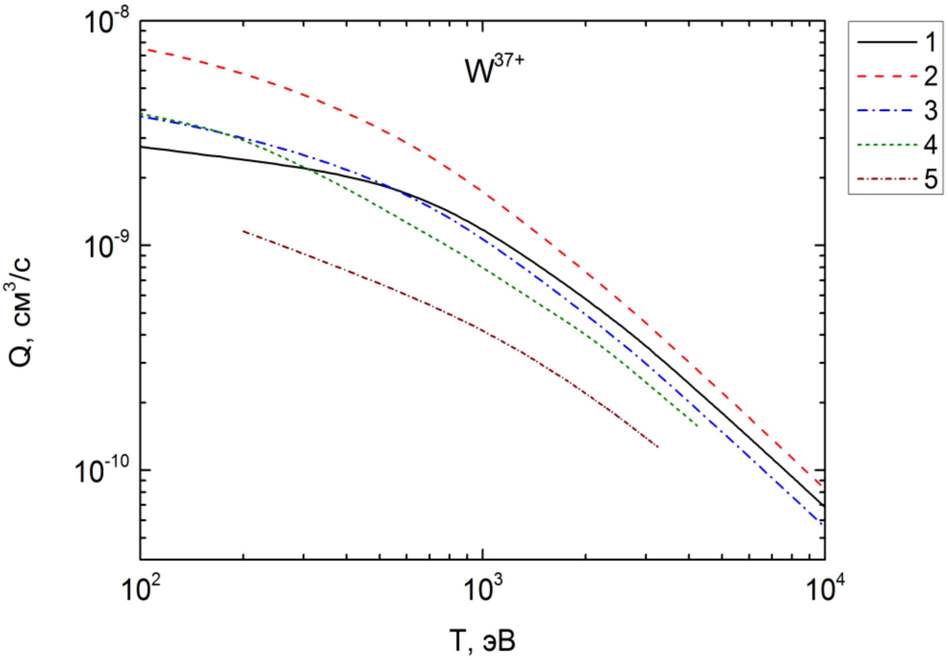


Рис.1 Сопоставление статистических зависимостей скорости ДР иона W^{37+} от температуры с расчетами поуровневыми кодами: (1) - модель Томаса-Ферми и модель ЛПЧ; (2) - модель Томаса-Ферми с парциальной по *L* плотностью электронов и модель ЛПЧ с парциальной по *L* электронной плотностью; (3) - модель Томаса-Ферми с парциальной по *L* плотностью электронов и частотой Роста, (4) – данные кода FAC из [17], (5) – данные кода ADPAK [18].

В целом точность статистических моделей находится в пределах разброса поуровневых расчетных данных.

В третьей главе был рассмотрен новый канал радиационных потерь энергии альфа-частиц и изотопов водорода в плазме с тяжелыми примесями. Этот канал при больших температурах оказывается сравнимым с электронными радиационными потерями, учитывающими помимо линейчатого вклад тормозного и рекомбинационного излучения. Был произведен расчет радиационных потерь альфа-частиц, дейтронов, тритонов и электронов в статистической модели локальной плазменной частоты и в кулон-борновском приближении [11,12]. В модели локальной плазменной частоты радиационные потери имеют вид

$$q_{e,\alpha,d}^{LPF}=\left(a_0^3 2Ry\omega_a\frac{e^2}{\hbar}\right)\frac{3\pi^4 Z}{32\sqrt{3}}\int_0^{s_{e,\alpha,d}^{\max}}ds\cdot\frac{sx_s^2\varphi(x_s,q)}{|\varphi'(x_s,q)-\varphi(x_s,q)/x_s|}\int_{\mathrm{v}_{e,\alpha,d}^{\min}(s)}^{\mathrm{v}_{e,\alpha,d}^{\max}}d^3\mathrm{v}_{e,\alpha,d}\ f_{e,\alpha,d}(\mathrm{v}_{e,\alpha,d})\frac{g(\upsilon)}{\mathrm{v}_{e,\alpha,d}}\cdot\begin{cases}z_e^2\\ z_{\alpha,d}^2\,\mathrm{e}^{-2\pi\upsilon}\end{cases},$$

$$\text{где }\ \upsilon=\frac{e^2 z_{e,\alpha,d}z_{eff}Zs}{m_{e,\alpha,d}\mathrm{v}_{e,\alpha,d}^3},\ \ z_{eff}(s)=Z\left(\varphi(x_s,q)+\frac{qx_s}{x_0}\right),\ \ \mathrm{v}_{e,\alpha,d}^{\max}=\begin{cases}\infty\\ \sqrt{2E_{\max,\alpha}/m_\alpha}\\ \infty\end{cases},\ \ \mathrm{v}_{e,\alpha,d}^{\min}(s)=\begin{cases}\sqrt{2\hbar Zs/m_e}\\ \sqrt{\hbar Zs/2m_{\alpha,d}}\end{cases}, \qquad (2)$$

где $\varphi(x_s,q)$ – функция Томаса-Ферми, $s=\omega/(Z\ \omega_a)$ – редуцированная частота, $m_{e,\alpha,d}$, $z_{e,\alpha,d}$ – масса и заряд рассматриваемых частиц, $g(\upsilon)$ – гаунт-фактор, E_{max} – энергия альфа-частицы при рождении в термоядерной реакции. $f_{e,\alpha,d}(\mathrm{v}_{e,\alpha,d})$ – функция распределения по скоростям (для изотопов водорода и электронов – максвелловская, для альфа-частиц определялась кулоновской релаксацией на электронах [19])

$$f_\alpha(v_\alpha)=\frac{p(T)\tau_s(T)}{4\pi N_\alpha}\frac{1}{\mathrm{v}_\alpha{}^3+\mathrm{v}_*^3},N_\alpha=p(T)\tau_s(T)\int_0^1 dy\frac{y^2}{y_\alpha{}^3+y_*^3},y=\frac{\mathrm{v}_\alpha}{\mathrm{v}_{\max}},y_*=\frac{\mathrm{v}_*}{\mathrm{v}_{\max}}=\frac{1}{\sqrt{15}},$$

$$p(T)=\frac{<\sigma v>_{dt}N_e{}^2}{4},<\sigma v>_{dt}=9.1\cdot 10^{-16}e^{-0.572\cdot\left|\ln\left(\frac{T_e}{64.2}\right)\right|^{2.13}}[cm^3/c],\ \tau_s=\frac{0.02}{\lambda_e}10\frac{m_\alpha}{m_e}\frac{z_e^2}{z_\alpha^2}\frac{(T,\text{кэВ})^{3/2}}{N_e(\text{м}^{-3})/10^{20}}[c]. \qquad (3)$$

Здесь v_* – скорость термализации альфа-частиц.

В кулон-борновском приближении константа дипольного взаимодействия λ выражена через статистическое распределение сил осцилляторов [14] для суммирования по главному квантовому числу, а численные результаты [11,12] для скорости возбуждения с параметрами, удовлетворяющими выбранным тяжелым частицам, аппроксимированы. При этом произведение аргументов функции, описывающей скорости возбуждения, выражается через параметр адиабатического фактора [15]. Для альфа-частиц удельные радиационные потери имеют вид

$$q_\alpha = \frac{e^2}{\hbar v_{max}} z_\alpha^2 Z Ry \omega_a a_0^3 \frac{140}{I_\alpha} \int_0^1 dy \frac{y}{y^3 + y_*^3} \int_0^{I_p/Z} ds\ \kappa^2(s) \exp\left[-\frac{3.7(Zz_\alpha)^{1/2}}{y(\hbar v_{max}/e^2)} \cdot (s\kappa(s))^{1/2} \right],$$
$$I_\alpha = \int_0^1 dy \frac{y^2}{y_\alpha^{\ 3} + y_*^3} \qquad (4)$$

Сравнение результатов расчета радиационных потерь электронов в данных моделях между собой и с данными квантомеханического кода показало, что все подходы дают близкие результаты, в том числе включая поуровневые расчеты, что свидетельствует об эффективности статистических моделей в применении к расчету радиационных потерь также и для тяжелых заряженных частиц.

Важным параметром, необходимым для мониторинга плазмы, является соотношение между радиационными потерями альфа-частиц и электронов $R_{\alpha/e} = \frac{Q_\alpha}{Q_e} = \frac{N_\alpha}{N_e} \cdot \frac{q_\alpha}{q_e}$, где N_α – плотность альфа-частиц, а N_e = 10^{20} $м^{-3}$– плотность электронов в плазме. Отношение плотностей N_α/N_e определяется из баланса между скоростями рождения и термализации альфа-частиц, которая определяется их торможением на свободных электронах. Укажем, что эти потери энергии на свободных электронах сохраняются внутри плазмы, тогда как потери на связанных (примесных) электронах выносятся из плазмы в виде радиационных потерь. Эти последние гораздо меньше потерь на свободных электронах, что является условием стабильности работы термоядерной установки.

На рисунке 2 показан график зависимости от температуры отношения полных на один примесный ион радиационных потерь R альфа-частиц и электронов (с учетом тормозного, рекомбинационного излучения и излучения при диэлектронной рекомбинации).

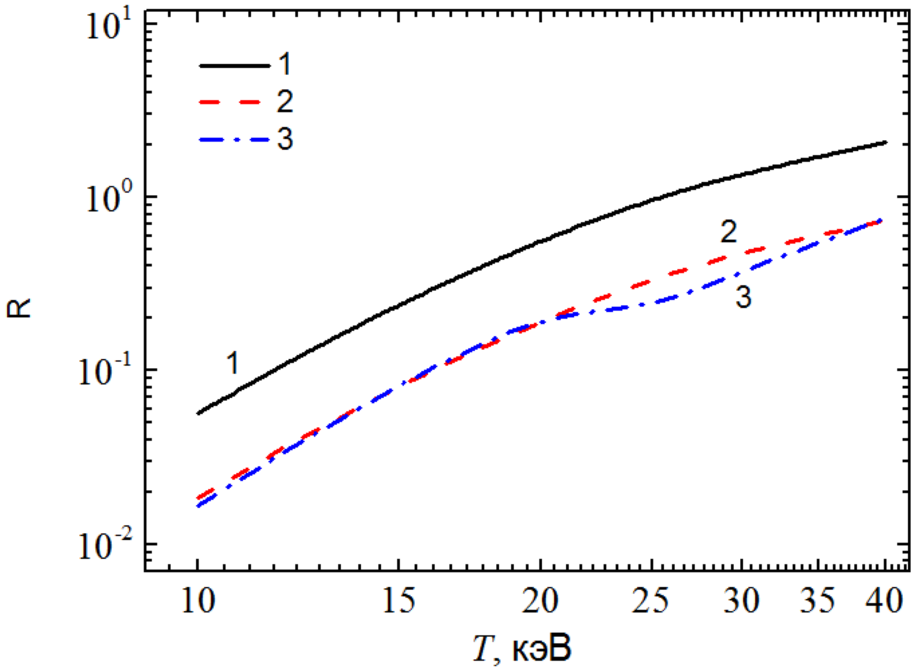


Рис. 2 Зависимость от температуры плазмы T отношения R полных на один примесный ион радиационных потерь альфа-частиц и электронов (с учетом тормозного, рекомбинационного излучения и излучения при диэлектронной рекомбинации) [16]: 1 – модель ЛПЧ с учетом гаунт-фактора (2); 2 – модель ЛПЧ; 3 – кулон-борновское приближение [11,12] (4).

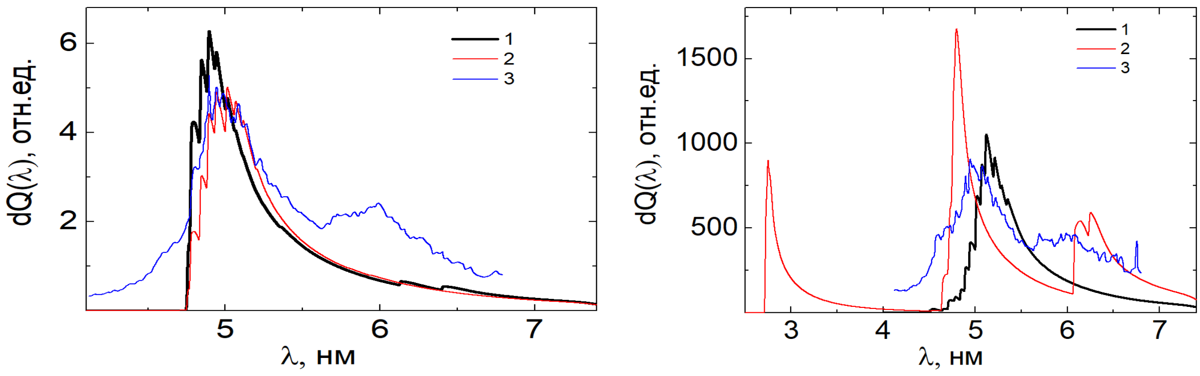
Как видно из рисунка, отношения потерь в основном возрастают, при этом статистические модели дают близкие друг к друг результаты. Отношение радиационных потерь альфа-частиц, рассчитанное в модели локальной плазменной частоты больше, чем в кулон-борновском приближении, и для альфа-частиц при 40 кэВ они превосходят электронные в 2 раза.

В четвертой главе проводилось моделирование квазиконтинуума тяжелых ионов, таких как вольфрам, гадолиний, свинец, золото в рамках статистической модели. Для описания распределения плотности электронов в ионе использовалось приближение Слэтера $n(r) \equiv n_{Sl}(r) = N_{Sl} r^{2k} e^{-2\gamma r}$ с параметрами k и γ, позволяющими выделить конкретные электронные оболочки с заданными главным и орбитальным квантовыми числами. Кроме того, его использование позволяло воспроизвести характерную особенность таких спектров, а именно наличие обрыва в области коротких длин волн. Параметры распределения подбирались таким образом, чтобы максимально точно воспроизводить положение основных пиков отдельно выделенных ионов в наблюдаемом спектре. Для сравнения с экспериментальными данными спектральное распределение радиационных потерь отдельного иона сворачивалось с аппаратной функцией, имеющей гауссовый вид. Кроме того, они усреднялись по функции распределения по зарядовым состояниям, также имеющим гауссову форму. Для расчёта распределений по зарядовым состояниям примесей тяжелых элементов в рамках статистической теории были рассчитаны отношения скорости ионизации [17–21] к скорости диэлектронной рекомбинации [22], и по этим данным построено распределение по зарядовым состояниям при заданной температуре. Для спектральных линейчатых радиационных потерь из объема dV на частоте перехода ω и в интервале частот $d\omega$ в рамках указанных приближений получается выражение

$$dQ(\omega)_z = \frac{2\hbar}{c^3}\omega^3 \int d\omega'\,\omega' r_{\max}\left[\frac{r_{\max}^2 + 4\Delta r^2\,|\ln(\omega'/\omega^*)|}{\gamma\Delta r\sqrt{|\ln(\omega'/\omega^*)|}}\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi\delta_w}}\,e^{-\frac{(\omega-\omega')^2}{2\delta_w}}\,d\omega\cdot dV, \tag{5}$$

где $r_{max}=k/\gamma$ – максимум функции Слетера, $\Delta r = \sqrt{\frac{n_{Sl}(r_{\max})}{|n_{Sl}''(r_{\max})|}} = \frac{1}{\gamma}\sqrt{\frac{k}{2}}$ ширина гауссовского распределения, ω^* в (6) соответствует максимально возможной частоте спектра, то есть является «частотой отсечки», δ_W – квадрат полуширины аппаратной функции предполагаемого спектрометра. Величина δ_W в атомных единицах выбрана равной 0.02, чтобы отношение δ_W/ω^2 соответствовало работе [23]. Это оказывается вполне достаточным для получения огибающих линий спектра в статистическом подходе.

В рамках статистической теории были получены усредненные огибающие спектров для вышеперечисленных элементов при различных температурах. Сравнение результатов численных расчетов в статистической модели с данными квантовых поуровневых расчетов и с экспериментальными данными на термоядерных установках продемонстрировало удовлетворительное согласие. На рисунке 3 приведено сравнение теоретического расчета квазиконтинуума вольфрама с экспериментальными данными.



(а) (б)

Рис. 3. Спектральное распределение мощности радиационных потерь вольфрама при температуре T_e=1.5 кэВ (а) и T_e=3 кэВ (б). 1 – теоретические расчеты со средним зарядом, рассчитанным в статистической модели; 2 – теоретические расчеты со средним зарядом, рассчитанным по данным работы [16]; 3 – экспериментальные данные LHD [23].

Как экспериментальные данные, так и результаты теоретических расчетов приведены к единому масштабу и представлены в относительных единицах. Видно, что формы экспериментальных и теоретических удельных линейчатых спектральных радиационных потерь, в которых использовалась статистическая модель для расчета распределения примеси по зарядовым состояниям удовлетворительно согласуются друг с другом, что позволяет утверждать, что статистический подход применим для описания спектральных потерь в области 2-8 нм, отвечающей наблюдаемому квазиконтинууму тяжелых ионов в токамаках и стеллараторах. Степень соответствия с экспериментом может заметно варьироваться. Проблема состоит в моделировании электронной плотности сложных электронных конфигураций одним членом слэтеровского разложения, которое улавливает основные особенности спектров. Однако, для описания деталей спектров различных электронных конфигураций одного члена может быть недостаточно. Также наблюдается некоторая разница при использовании различных методов расчета распределений по зарядовым состояниям, особенно при больших температурах.

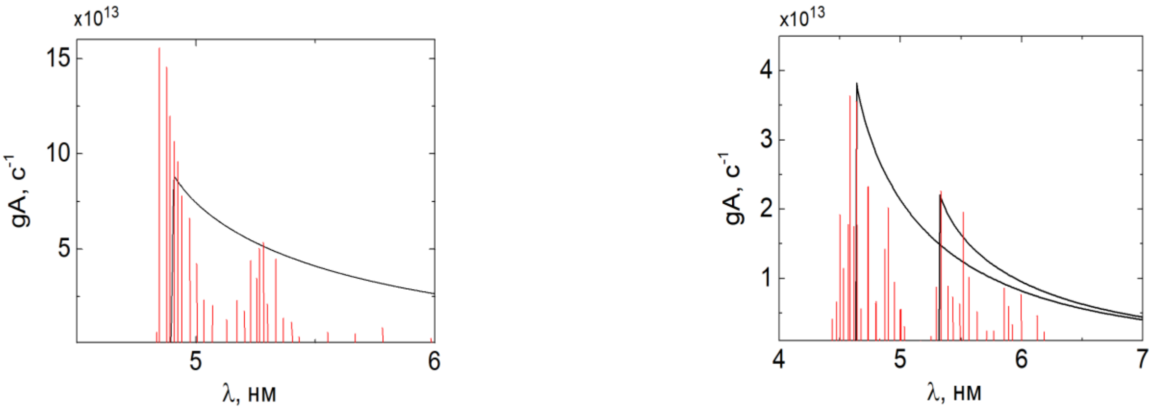
Были рассчитаны вероятности поуровневых переходов в ионах вольфрама. Спектральное распределение вероятностей пропорционально силам осциллятора, которые в приближении статистической модели, как было показано, можно заменить на распределение электронной плотности многоэлектронного иона (ср. [25])

$$a(\omega)=\frac{dA}{d\omega}=\int_0^r dr'\,4\pi r'^2\,n(r')\cdot\frac{2\pi^2e^2}{mc}\cdot\frac{\omega^2}{\pi^2c^2}\delta(\omega-\omega_p(r')). \qquad (6)$$

После интегрирования (5) сначала по частоте с переменным верхним пределом (текущее ω), а затем по радиусу и преобразования к шкале длин волн получается следующее выражение для спектрального распределения вероятностей переходов

$$A(\lambda)=\frac{32\pi^2e^4}{m^2c^3}\cdot\left[\int_0^{r_\lambda^-} r^2n^2(r)dr+\int_{r_\lambda^+}^{\infty} r^2n^2(r)dr\right], \qquad (7)$$

где $r_\lambda^\pm = r_{\max} \pm 2\Delta r\sqrt{|\ln(\lambda^*/\lambda)|}$. На рисунках 4а и 4б показаны также положения спектральных линий с их вероятностями радиационных переходов, полученные на основе поуровневых расчетов [23].



(а) (б)

Рис.4. Сравнение статистических распределений коэффициентов Эйнштейна, умноженных на статистический вес с результатами квантовых расчетов, для W^{20+} в переходе $4d^{10}4f^8$-$4d^94f^9$, а для иона W^{35+} – комбинации переходов $4p^64d^3$–$4p^54d^4$ + $4p^64d^24f$. Вертикальные линии – результаты поуровневых расчетов [23], а огибающие результаты статистической модели.

Видно, что результаты статистического подхода являются огибающими массива индивидуальных спектральных линий для отдельного иона в соответствии с постановкой задачи в статистической модели. Видно, что массив переходов в ионе вольфрама W^{20+}, отвечающий переходам $4d^{10}4f^{8}$-$4d^{9}4f^{9}$ из одной оболочки описывается также одним распределением атомной электронной плотности слэтеровского типа, тогда как для иона W^{35+} необходим учет двух распределений плотности в соответствии с двумя массивами переходов $4p^{6}4d^{3}$–$4p^{5}4d^{4}$ + $4p^{6}4d^{2}4f$. Таким образом подчеркивается, что плазменная модель селективна по структуре электронных оболочек. Кроме того, из рисунков видно хорошее соответствие профилей огибающих, а также абсолютных значений вероятностей переходов (10^{13} – 10^{14} c^{-1}). Удовлетворительное согласие результатов обоих расчетов указывает на достаточную реалистичность используемой плазменной модели.

Заключение

Развиты статистические модели для расчета радиационно-столкновительных процессов с участием ионов тяжелых примесей, в частности вольфрама. Применение статистической модели атома значительно упрощает их расчет и позволяет получить универсальное описание атомных процессов с многоэлектронными ионами, позволяющее применять его результаты к любому типу многоэлектронных ионов.

- Произведен расчет скорости диэлектронной рекомбинации ионов тяжелых примесей. Статистическая модель показала, что имеется возможность универсального описания процесса диэлектронной рекомбинации для многоэлектронных систем с различным зарядом ядра и при разных температурах в диапазоне от 100 эВ до 40 кэВ. На основе развитой модели создан численный код для расчета скоростей диэлектронной рекомбинации с участием ионов различных химических элементов. Наилучшие результаты, как показало сравнение с данными других численных расчетов, статистическая модель дает для ионов примесей с большим зарядом ядра.

Соответствие между результатами моделирования статистическим методом и экспериментальными, а также расчетными данными других кодов наблюдается в области больших электронных температур 100-1000 эВ, характерных для современных термоядерных установок.

- В рамках статистической модели и кулон-борновского приближения рассчитаны радиационные потери альфа-частиц, дейтронов и тритонов. Это новый канал потерь энергии альфа-частиц и изотопов водорода плазмы, который при больших температурах сопоставим с полными электронными радиационными потерями, включающими все каналы радиационных переходов. Прямые радиационные потери альфа-частиц представляют общефизический интерес также для определения летальных концентраций тяжелых примесей, когда потери энергии на свободных и связанных электронах оказываются сравнимыми. Однако летальная концентрация примесей вольфрама оказывается в этом случае слишком большой (порядка 10^{-3}).

- Произведен расчет квазиконтинуума тяжелых многоэлектронных ионов. Показано, что предложенная статистическая модель описывает форму спектров, связанную с наличием частот отсечки, и находится в разумном соответствии с экспериментами на современных термоядерных установках. Она позволяет также построить огибающие спектральных распределений массива радиационных переходов внутри иона, совпадающие с результатами поуровневых расчетов.

Публикации по теме диссертации

1. **Leontyev D. S.**, Lisitsa V. S. Statistical Model of Dielectronic Recombination of Heavy Ions in Plasmas // Contr. Plasma Phys. – 2016. – V. **56**. – P 846-854.

2. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Статистические скорости диэлектронной рекомбинации многоэлектронных ионов в плазме // ЖЭТФ. – 2017. – Т. 152. – В. 4. – С. 781-798.

3. **Леонтьев Д. С.** Сопоставление статистических моделей для расчета скорости диэлектронной рекомбинации на тяжелых примесях в термоядерной плазме // ВАНТ ТС. – 2017. – Т. 40. – В. 2. – С. 19-22.

4. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Радиационные потери альфа-частиц на тяжелых ионах в термоядерной плазме // Письма в ЖЭТФ. – 2017. – Т. 106. – В. 7. – С. 417-421.

5. Krupin V. A., Nurgaliev M. R., Klyuchnikov L. A., **Leontyev D. S.** et al. Experimental study of tungsten transport properties in T-10 plasma // Nuclear Fusion –2017. – V.10. – P. 066041.

6. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Статистическая модель квазиконтинуума тяжелых ионов в горячей плазме // Физика плазмы. – 2020. – Т. 46. – В. 3. С. 195-205.

7. **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С. QUASILPF // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020612088 от 14 февраля 2020.

Материалы конференций:

1. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В.С., Шурыгин В. А. Расчет скорости диэлектронной рекомбинации в статистической модели // Тезисы XLIII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Звенигород, 2016, С. 194.

2. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Скорость диэлектронной рекомбинации в статистической модели // Тезисы XXV Съезд по спектроскопии, Троицк, 2016, С. 314.

3. Demura A. V., **Leontyev D. S.**, Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Dielectronic recombination rate in statistical model // EPJ Web Conf. V.132, 2017, XXV-th Congress on Spectroscopy, 2016, P. 03028.

4. **Леонтьев Д. С.** Сопоставление статистических моделей для расчета диэлектронной рекомбинации // Тезисы XIV Курчатовская междисциплинарная молодежная школа, Москва, 2016, С. 233.

5. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Расчет скорости диэлектронной рекомбинации в приближении крамерсовской электродинамики // Тезисы X конференции «Современные средства диагностики плазмы и их применение», Москва, 2016, С. 107.

6. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Розми Ф., Шурыгин В. А. Статистическая модель диэлектронной рекомбинации с распределением электронной плотности Хартри-Фока // Тезисы XLIV Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Звенигород, 2017, С. 210.

7. Demura A. V., **Leontyev D. S.**, Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Radiative losses of alpha particles on tungsten impurities in thermonuclear plasmas // Proc. 44th EPS Conf. on Plasma Physics, Belfast, Northern Ireland, 2017, P4.101.

8. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Статистические модели радиационных потерь альфа-частиц на ионах вольфрама в термоядерной плазме // Тезисы XLV Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Звенигород, 2018, С. 212.

9. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Применение статистической модели к расчету спектральных радиационных потерь на ионах вольфрама // Тезисы XI конференция «Современные средства диагностики плазмы и их применение», Москва, 2018, С. 38.

10. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Квазиконтинуум вольфрама в термоядерной плазме: статистическая модель // Тезисы XLVI Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Звенигород, 2019, С. 76.

11. Demura A. V., **Leontyev D. S.**, Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Statistical modeling of heavy ions quasicontinuum in thermonuclear plasmas // Proc. 46th EPS Conf. on Plasma Physics, Milan, Italy, 2019, P1.1066.

12. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Моделирование вероятности переходов ионов вольфрама в рамках статистической теории // Тезисы XLVII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Звенигород, 2020, С. 268.

13. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Расчет отношения радиационных потерь в термоядерной плазме для быстрых тяжелых частиц и электронов // Тезисы XII конференция «Современные средства диагностики плазмы и их применение», Москва, 2020, С. 18.

14. Демура А. В., **Леонтьев Д. С.**, Лисица В. С., Шурыгин В. А. Радиационные потери быстрых тяжелых частиц в термоядерной плазме // Тезисы XLVIII Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, Звенигород, 2021, С. 220.

Цитируемая литература

1. Pütterich T. et al. Observations on the W-transport in the core plasma of JET and ASDEX Upgrade // Plasma Phys. Control. Fusion. – 2013. – Vol. 55. – № 12. – P. 124036.

2. Kramida A. Cowan Code: 50 Years of Growing Impact on Atomic Physics // Atoms. Multidisciplinary Digital Publishing Institute. – 2019. – Vol. 7. – № 3. – P. 64.

3. Гамбош П. Статистическая теория атома и ее применения. М.: Издательство Иностранной литературы, 1951. 394 с.

4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В десяти томах. Том III Квантовая Механика (Нерелятивистская Теория). М.: Физматлит, 2001. 808 с.

5. Brandt W., Lundqvist S. Atomic Oscillations in the Statistical Approximation // Physical Review. – 1965. – Vol. 139 – № 3A. – P. 612–617.

6. Vinogradov A. V., Tolstikhin O.I. Plasma approach to the theory of photoabsorption and polarizability of complex atoms // JETP. – 1989. – Vol. 69. – № 4. – P. 683–688.

7. Vinogradov A.V., Pustovalov V.V, Shevel’Ko V.P. Statistical Theory of the Polarizability of Atoms and Ions // JETP. – 1973. – Vol. 36. – № 2. – P. 252.

8. Гаранин С.Ф., Кравец Е.М., Мамышев В. И., Токарев В. А. Статистический подход к рассмотрению излучения многозарядных ионов в плазме с корональным равновесием // Физика плазмы. – 2009. – Т. 35. – В. 8. – с. 744–757.

9. Демура А.В., Кадомцев А. В., Лисица В. С., Шурыгин В. А. Статистическая модель радиационных потерь тяжелых ионов в плазме // Письма в ЖЭТФ. – 2013. – Т. 98. – В. 12. – с. 886–890.

10. Demura A. V., Kadomtsev M. B., Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Electron impact ionization of tungsten ions in a statistical model // JETP Lett. – 2015. – Vol. 101. – P. 90–93.

11. Виноградов А.В, Скобелев И.Ю., Урнов А. М., Шевелько В. И. Сечения и скорости неупругих переходов между близкими уровнями // Успехи Физических Наук. – 1980. – Т. 119. – с. 120–129.

12. Skobelev I.Y., Vinogradov A. V. Coulomb-Born and unitarised Coulomb-Born cross sections and rates of inelastic transitions in ion-ion collisions // J. Phys. B At. Mol. Phys. – 1978. – Vol. 11. – № 16. – P. 2899–2905.

13. Kogan V.I., Kukushkin A.B., Lisitsa V.S. Kramers electrodynamics and electron-atomic radiative-collisional processes // Phys. Rep. – 1992. – Vol. 213. – № 1–2 – P. 1–116.

14. Буреева Л.А., Лисица В.С. Возмущенный атом. М.: ИздАТ, 1997. 463 с.

15. Bethe H.A., Salpiter E.E. Quantum mechanics of one- and two-electron atoms. Berlin: Springer-Verlag, 1957. 375 p.

16. Rost J.M. Analytical total photo cross section for atoms // J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. – 1995. – Vol. 28. – № 19. – P. L601–L606.

17. Wu Z., Zhang Y., Fu Y. et al. Dielectronic recombination rate coefficients of initially rubidium-like tungsten // Eur. Phys. J. D. – 2015. – Vol. 69. – P.140.

18. Asmussen K., Fournier K., Laming J. et al. Spectroscopic investigations of Tungsten in the EUV region and the determination of ITS concentration in tokamaks // Nucl. Fusion. – 1998. – Vol. 38. – P. 967–986.

19. Путвинский С.В. Альфа-частицы в токамаке // Вопросы теории плазмы. – 1990. – Т. 18. – с. 209–318.

20. Гаранин С.Ф., Кравец Е.М. Расчет спектральных и росселандовых пробегов в плазме с многозарядными ионами на основе статистического подхода // ЖЭТФ. – 2012. – Т. 142. – В. 5. – с. 1052–1066.

21. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз. 1963. 640 с.

22. Pütterich T., Neu R., Dux R. et al. Calculation and experimental test of the cooling

factor of tungsten // Nucl. Fusion. – 2010. – Vol. 50. – P.025012.

23. Demura A. V., Kadomtsev M. B., Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Statistical model of electron impact ionization of multielectron ions // J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. – 2015. – Vol. 48. – P.055701.

24. Demura A. V., Kadomtsev M. B., Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Tungsten ions in plasmas: Statistical theory of radiative-collisional processes // Atoms. – 2015. – Vol. 3. – P. 162–181

25. Demura A. V., Kadomtsev M. B., Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Universal statistical approach to radiative and collisional processes with multielectron ions in plasmas // High Energy Density Phys. – 2015. – Vol. 15. – P. 49–58.

26. Demura A. V., Leont'iev D. S., Lisitsa V. S., Shurygin V. A. Statistical dielectronic recombination rates for multielectron ions in plasma // JETP. – 2017. – Vol. 125. – P. 663–678.

27. Harte C.S., Suzuki C., Kato T. et al. Tungsten spectra recorded at the LHD and comparison with calculations // J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. – 2010. – Vol. 43. – P. 205004.