

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 **01.04.08** – Физика плазмы

Москва
2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении
«Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Научный руководитель:

Лисица Валерий Степанович доктор физико-математических наук, начальник лаборатории теории излучения отдела теории плазмы Курчатоваского комплекса термоядерной энергетики и плазменных технологий НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва.

Официальные оппоненты:

Ведущая организация:

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, сделанных 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. Помимо этого, накопление вольфрама в центре плазменного шнура в H-режиме может приводить к потере устойчивости из-за развития МГД процессов, срыву разряда, переходу в L-моду. Поэтому важно проводить постоянный мониторинг плазмы, в частности следить за содержанием примесей тяжелых ионов в плазме. Для определения ионизационного баланса необходимо рассчитывать скорости радиационно-столкновительных процессов, что является весьма нетривиальной задачей в случае многоэлектронных ионов. Существующие численные коды, восходящие к работам Кована, весьма громоздки и требуют значительного времени для расчета спектров многоэлектронных ионов. Кроме того, точность расчетов по этим кодам достаточно ограничена [1] и для их верификации нередко требуется привлечение экспериментальных данных.

С точки зрения атомной физики вольфрам выделяется среди всех других примесей в плазме, чрезвычайной сложностью атомной структуры и диапазоном возможных изменений заряда ионов (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 энергий. В настоящей работе в качестве такого метода расчета использованы статистические модели многоэлектронных ионов. Такой метод позволяет получить универсальные результаты для различных атомных процессов в виде достаточно простых функционалов от распределения электронной плотности в многоэлектронных ионах. Первые расчеты процессов фотоионизации, основанные на модели локальной плазменной частоты (ЛПЧ), были проведены Брандтом и Лундквистом [2]. Обоснование плазменной модели атома на основе решения уравнения Власова для томас-фермиевского атома было дано Виноградовым и Толстихиным [3]. 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. Эти данные наряду со статистическими моделями 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 протеканию термоядерной реакции. Это приводит к появлению нового канала радиационных потерь, связанного с возбуждением примесей не только электронами, но и ионами плазмы. В частности, возможно прямое возбуждение примесей альфа-частицами, приводящее к их радиационным потерям энергии. Обычная схема релаксации энергии альфа-частиц связана с их упругими столкновениями с электронами плазмы, которые затем теряют энергию

на возбуждении примесей. Оценка прямого канала радиационных потерь альфа-частиц представляет общефизический интерес. Расчеты скоростей возбуждения многоэлектронных ионов примеси ионами плазмы является многоконфигурационной задачей теории столкновений, достаточно сложной даже для простейших двухуровневых систем. Использование статистических методов расчета позволяет 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 имеет 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

Целью представленной работы является теоретическое исследование радиационно-столкновительных процессов с участием тяжелых ионов в рамках статистической модели атома.

Для достижения цели были поставлены и решены следующие задачи:

- Разработка моделей расчета скорости диэлектронной рекомбинации на базе статистической теории атома.
- Создание численного кода и проведение численных расчетов скоростей диэлектронной рекомбинации для ряда многоэлектронных ионов различных химических элементов и их тестирование путем сравнения с данными более детальных квантовомеханических кодов.
- Исследование нового канала радиационных потерь – радиационные потери быстрых альфа-частиц на тяжелых примесях и сравнение их с радиационными потерями электронов в термоядерной плазме.
- Исследование спектральных радиационных потерь (квазиконтинуума) тяжелых элементов (в частности, вольфрама) в условиях термоядерной плазмы. Сравнение с экспериментами на современных термоядерных установках.
- Вычисление вероятности переходов внутри многоэлектронного тяжелого иона. Сравнение огибающих спектров с результатами поуровневых расчетов.

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 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 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) моделях.
- Впервые смоделирован квазинконтинуум 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 сравнимой точности результатов. Это открывает возможности быстрого расчета ионизационного равновесия примесей в термоядерной плазме.
- Произведен расчет нового канала радиационных потерь быстрых альфа-частиц и изотопов водорода на тяжелых ионах. Показано, что радиационные потери быстрых ионов в плазме могут быть сравнимы с электронными потерями.

- Проведенное моделирование квазиконтинуума тяжелых ионов пригодно к использованию для диагностики и мониторинга содержания тяжелых примесей в плазменном шнуре.

Степень достоверности результатов проведенных исследований

Достоверность результатов данного исследования обеспечивается использованием современных методов расчета и сравнением с данными экспериментов и других численных кодов, использующих поуровневые квантовомеханические модели.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту

- Построена статистическая модель расчета скорости диэлектронной рекомбинации тяжелых ионов в горячей плазме.
- Создан численный код и проведено сравнение статистической модели с результатами поуровневых расчетов скорости диэлектронной рекомбинации, подтверждающее достаточно высокую точность развитой модели.
- Произведен расчет нового канала радиационных потерь альфа-частиц, дейтронов и тритонов на тяжелых ионах на основе статистических моделей возбуждения многоэлектронных ионов тяжелыми частицами.
- Предложена статистическая модель квазиконтинуума тяжелых ионов и обоснована характерная форма их спектров, связанная с обрывом в области малых длин волн. Сравнение расчетов для серии ионных спектров ряда тяжелых элементов (гадолиния, вольфрама, золота, свинца) находится в удовлетворительном согласии с экспериментами на современных термоядерных установках таких как LHD и TEXT.
- Проведены расчеты огибающих квазиконтинуума ряда электронных конфигураций многоэлектронных ионов. Сравнение с результатами

поуровневых расчетов подтверждает точность развитых статистических моделей.

Личный вклад автора

Лично автор проводил все расчеты при помощи самостоятельно написанных кодов, использующих статистическую модель. Также он обрабатывал и интерпретировал результаты, которые легли в основу представленной работы. Постановка задач проводилась 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 18 публикациях, в том числе в 6 рецензируемых научных журналах и 14 материалах конференций, в качестве объекта интеллектуальной собственности зарегистрирована программа для ЭВМ.

Содержание работы

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

Первая глава посвящена обзору работ по статистической модели и исследованиям радиационно-столкновительных процессов в плазме с участием тяжелых ионов, таких как диэлектронная рекомбинация, возбуждение электронами и быстрыми тяжелыми частицами. Проведен обзор трудов по изучению спектров тяжелых ионов (в частности, вольфрама), полученных на различных термоядерных установках. Рассмотрены статистические модели и опыт их применения для изучения процессов, протекающих в плазме. Эти модели применялись для расчета коллективных возбуждений оболочек, скорости ионизации и поляризуемости тяжелых атомов и ионов, подтверждающие эффективность статистических моделей. Анализ публикаций по исследованию диэлектронной рекомбинации 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 метода расчета. Проведен обзор работ, посвященных расчету радиационных потерь в плазме. 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 тяжелых частиц 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 проводится расчет 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: 1) модель локальной плазменной частоты (ЛПЧ), согласно которой возбуждаемые частоты соответствуют плазменным частотам внутри иона,

которые зависят от локальной плотности электронов [2]: $\omega_p(r) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n(r)}{m_e}}$; 2)

Приближение крамерсовской электродинамики [4,5], согласно которой возбуждаемые частоты определяются изменением углового скорости вращения вблизи точки поворота классической траектории движения электрона (модель Роста [4]): $\omega_R = \frac{\hbar(L+1/2)}{mr^2}$, где L – орбитальный момент электронов в ионе.

Используется связь между распределением сил осцилляторов и электронной плотностью внутри иона согласно правилу Райхе-Куна [6,7]: $f_{if} = 4\pi n(r) r^2 dr$. Таким образом, характеристики радиационно-столкновительных процессов можно выразить через распределения электронной плотности, и, следовательно, они являются функционалами локального электронного распределения внутри иона.

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 и получены общие формулы

для скорости диэлектронной рекомбинации, просуммированное по главным и орбитальным квантовым числам. В общем виде скорость диэлектронной рекомбинации имеет вид

$$\begin{aligned}
 Q_{DR}^{st}(T) &= 2^{11/2} \pi^{3/2} a_0^3 \omega_a \left(\frac{2Ry}{T} \right)^{3/2} \frac{1}{Z_i^2} \cdot \sum_L \int_{r_{\min}^{(L)}}^{r_{\max}^{(L)}} dr \cdot r^2 \cdot n_L(r) \cdot \left(\frac{\omega^{(L)}(r)}{\omega_a} \right) \cdot \\
 &\cdot \int_1^{\infty} dt \cdot \exp \left[-\frac{\hbar \omega^{(L)}(r)}{T} \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \cdot \left(\int_0^{l_{\max}} dl \cdot \frac{(2l+1) \cdot l \cdot G \left(\frac{\omega^{(L)}(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right)}{t^3 + A(r, L, l)} \right), \quad (1) \\
 A(r, L, l) &= \frac{2^{1/2}}{\pi} \left(\frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \frac{1}{Z_i^3} \left(\frac{\omega_a}{\omega^{(L)}(r)} \right)^{1/2} l \cdot G \left(\frac{\omega^{(L)}(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right), \\
 l_{\max} &= t \cdot Z_i \sqrt{\frac{\omega_a}{2\omega^{(L)}(r)}} - 1.
 \end{aligned}$$

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; $G(u) = u [K_{2/3}^2(u) + K_{1/3}^2(u)]$. $K_{1/3}(z)$, $K_{2/3}(z)$ – 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, селективную по орбитальному моменту ионного остова с частотами, также зависящими от орбитального момента остова; модель Томаса-Ферми, селективную по орбитальному моменту ионного остова с частотой, определяемой изменением угловой скорости вблизи точки поворота траектории электрона (частотой Роста [4,8]).

На рисунке 1 представлены результаты расчетов скорости диэлектронной рекомбинации в зависимости от электронной температуры плазмы, а также сравнение с данными численных расчетов. 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.

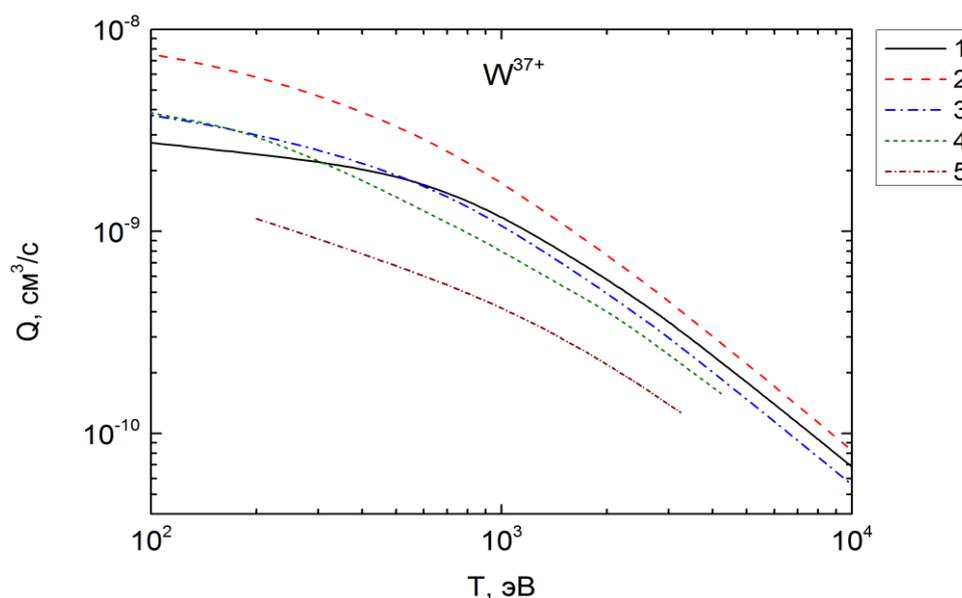


Рис.1 Сопоставление статистических зависимостей скорости ДР иона W^{37+} от температуры с расчетами поуровневыми кодами: (1) - модель Томаса-Ферми и модель ЛПЧ; (2) - модель Томаса-Ферми с электронными оболочками ионного остова с орбитальным моментом L и Брандта-Лундквиста с парциальной по L электронной плотностью; (3) - модель Томаса-Ферми с парциальной по L плотностью электронов и частотой Роста, (4) – данные кода FAC из [9], (5) – данные кода ADPAK [10].

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. 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

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

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

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, $g(v)$ – гаунт-фактор, E_{\max} – энергия альфа-частицы при рождении в термоядерной реакции. $f_{e,\alpha,d}(v_{e,\alpha,d})$ – функция распределения по скоростям (для изотопов водорода и электронов – максвелловская, для альфа-частиц определялась кулоновской релаксацией [13])

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

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

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

$$q_\alpha = \frac{3\pi^2}{64} \cdot 140 \cdot \frac{z_\alpha^2 Z}{v_{\max}} \cdot \frac{\int_0^1 dy \frac{y^2}{y^3 + y_*^3} \frac{1}{(yv_{\max})} \int_0^{I_p/Z} ds e^{-3.7 \frac{\lambda(s)Zs}{(yv_{\max})^2}} \frac{s \cdot x_s^2 \varphi(x_s, q)}{|\varphi'(x_s, q) - \varphi(x_s, q)/x_s|}, \quad (4)$$

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 $N_e = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ – плотность электронов в плазме. Отношение плотностей N_α/N_e определяется из баланса между скоростями рождения и термализации альфа-частиц

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).

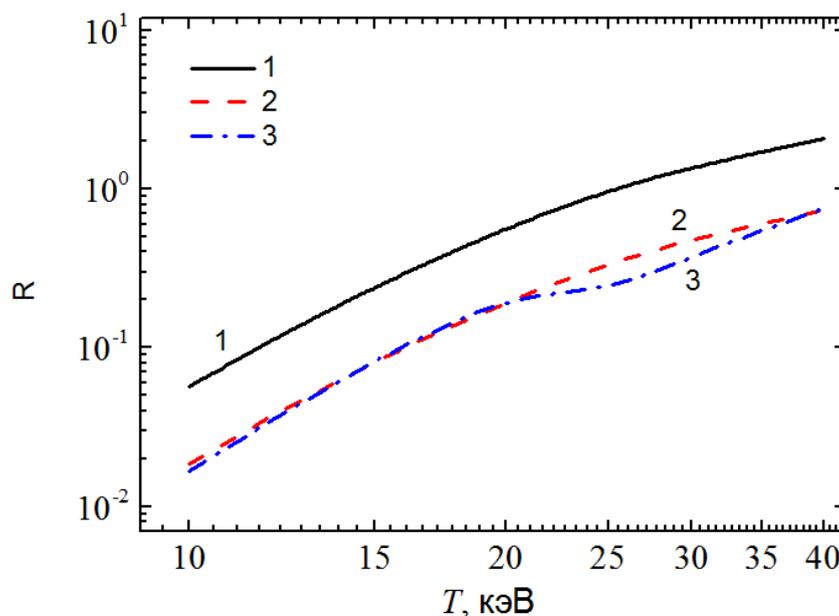


Рис. 2 Зависимость от температуры плазмы T_e отношения R полных на один примесный ион радиационных потерь альфа-частиц и электронов (с учетом тормозного, рекомбинационного излучения и излучения при диэлектронной рекомбинации) [16]: 1 – модель ЛПЧ с учетом гаунт-фактора (2); 2 – модель ЛПЧ; 3 – кулон-борновское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

Как видно из рисунка, отношения потерь в основном возрастают, при этом статистические модели дают близкие друг к другу 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

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

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 продемонстрировано сравнение теоретического расчета квазиконтинуума вольфрама с экспериментальными данными.

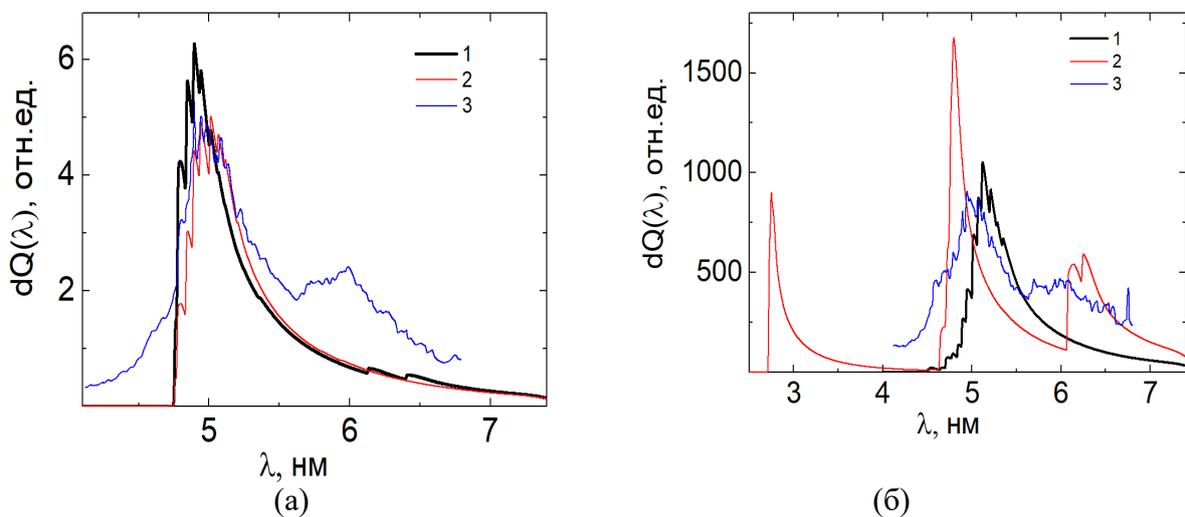


Рис. 3. Спектральное распределение мощности радиационных потерь вольфрама при температуре $T_e=1.5$ кэВ (а) и $T_e=3$ кэВ (б). 1 – теоретические расчеты со средним зарядом, рассчитанным в статистической модели; 2 – теоретические расчеты со средним зарядом, рассчитанным по данным работы [16]; 3 – экспериментальные 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. [21])

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

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

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

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].

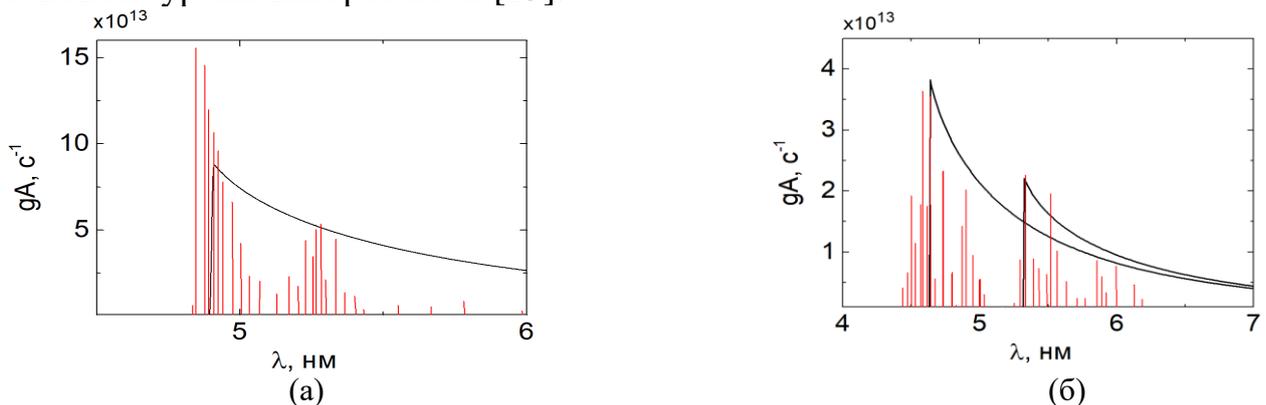


Рис.4. Сравнение статистических распределений коэффициентов Эйнштейна, умноженных на статистический вес с результатами квантовых расчетов, для W^{20+} в переходе $4d^{10}4f^8 - 4d^9 4f^9$, а для иона W^{35+} – комбинации переходов $4p^6 4d^3 - 4p^5 4d^4 + 4p^6 4d^2 4f$. Вертикальные линии – результаты 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 $4d^{10}4f^8-4d^94f^9$ 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 $4p^64d^3-4p^54d^4 + 4p^64d^24f$. 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 ($10^{13} - 10^{14} \text{ с}^{-1}$). Удовлетворительное согласие результатов обоих расчетов указывает на достаточную реалистичность используемой плазменной модели.

Заключение

Развиты статистические модели для расчета радиационно-столкновительных процессов с участием тяжелых ионов, в частности вольфрама. Применение статистической модели атома значительно упрощает их расчет и позволяет получить универсальное описание атомных процессов с многоэлектронными ионами.

- Произведен расчет скорости диэлектронной рекомбинации тяжелых ионов. Статистическая модель показала, что имеется возможность универсального описания процесса диэлектронной рекомбинации для многоэлектронных систем с различным зарядом ядра и при разных температурах. На основе развитой модели создан численный код для расчета скоростей диэлектронной рекомбинации различных химических элементов. Наиболее хорошие результаты, как показало сравнение с данными других численных расчетов, статистическая модель дает для ионов с большим зарядом ядра. Хорошее соответствие между результатами наблюдается в области больших

электронных температур (порядка 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 тяжелых частиц плазмы, который при больших температурах сопоставим с электронными радиационными потерями. Прямые радиационные потери альфа-частиц представляют общефизический интерес для определения летальных концентраций тяжелых примесей.
- Произведен расчет квазиконтинуума тяжелых многоэлектронных ионов. Показано, что 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. Kramida A. Cowan Code: 50 Years of Growing Impact on Atomic Physics // Atoms. – 2019. – Vol. 7. – № 3. – P. 64.
2. Brandt W., Lundqvist S. Atomic Oscillations in the Statistical Approximation // Physical Review. – 1965. – Vol. 139. – P. 612–617.
3. Vinogradov A. V., Tolstikhin O.I. Plasma approach to the theory of photoabsorption and polarizability of complex atoms // JETP. – 1989. – Vol. 69. – P. 683–688.
4. Kogan V.I., Kukushkin A.B., Lisitsa V.S. Kramers electrodynamics and electron-atomic radiative-collisional processes // Phys. Rep. – 1992. – Vol. 213. – P. 1–

5. Буреева, Л.А., Лисица В.С. Возмущенный атом. М.: ИздАТ, 1997. 463 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. В десяти томах. Том III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Физматлит, 2001. 808 с..
7. Bethe H.A., Salpiter E.E. Quantum mechanics of one- and two-electron atoms. Berlin: Springer-Verlag, 1957. 375 p.
8. Rost J.M. Analytical total photo cross section for atoms // J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. –1995. – Vol. 28. – P. L601–L606.
9. 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.
10. 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.
11. 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. – P. 2899–2905.
12. 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.
13. Путвинский С.В. Альфа-частицы в токамаке // Вопросы теории плазмы. – 1990. – Т. 18. – с. 209–318.
14. 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.

15. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз. 1963. 640 с.
16. 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.
17. 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.
18. 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.
19. 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.
20. 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.
21. 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.
22. 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.
23. 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.