

Статистическая модель радиационных потерь тяжелых ионов в плазме

А. В. Демура¹⁾, М. Б. Кадомцев, В. С. Лисица, В. А. Шурыгин

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 ноября 2013 г.

Развит новый статистический подход к расчету радиационных потерь тяжелых многоэлектронных ионов в плазме. Метод основан на представлении атомной структуры как конденсированной среды, характеризующейся спектром элементарных возбуждений с плазменной частотой, определяемой локальной атомной электронной плотностью. В такой модели радиационные потери обусловлены возбуждением плазменных колебаний в атоме при его столкновениях с электронами плазмы и допускают универсальное (для всех типов многоэлектронных ионов) представление. Проведены расчеты радиационных потерь на ионах вольфрама в широком диапазоне температур, представляющем интерес для физики высокотемпературной плазмы. Показано, что результаты универсального статистического подхода находятся в пределах разброса данных современных численных кодов. Используемый в данной работе метод коллективных возбуждений атомов для расчетов радиационных потерь плазмы представляет общезначимый интерес. Прикладное значение работы состоит в разработке статистического метода расчета радиационных потерь плазмы на сложных атомах, позволяющего получить необходимые данные значительно быстрее и с меньшими затратами вычислительных ресурсов.

DOI: 10.7868/S0370274X13240053

Расчеты радиационных потерь тяжелых ионов в плазме приобрели особую актуальность в связи с использованием вольфрама в конструктивных элементах современных термоядерных установок [1]. Температурный диапазон, представляющий интерес для расчетов радиационных потерь, оказывается чрезвычайно широким: от нескольких электронвольт для пристеночной и диверторной плазмы до 40 килоэлектронвольт для центральных областей [1]. Энергетическая структура многоэлектронных состояний ионов вольфрама является очень сложной во всем диапазоне температур. Это требует проведения громоздких и трудоемких квантовомеханических расчетов как атомарной структуры, так и элементарных процессов, ответственных за заселения атомных уровней. Поскольку при вычислениях скоростных коэффициентов дополнительно используются приближения, хорошо работающие только в ограниченном температурном диапазоне, имеются значительные расхождения между результатами сложных детальных кодов [2, 3]. В этой ситуации для описания структуры тяжелых ионов представляется естественным использование общих статистических методов [4, 5], которые позволяют выявить скейлинги радиационных процессов во всей области темпера-

тур. В таком подходе атомные спектры могут быть представлены как коллективные возбуждения конденсированной среды [4]. Предлагаемое в данной работе применение статистических моделей [6, 7] позволяет разработать универсальный статистический подход к анализу радиационных потерь и метод их простого численного расчета.

Статистические модели основаны на представлении о коллективных колебаниях плазменного сгустка атомных электронов. В модели Брандта–Лунквиста [6] для описания таких колебаний использовано приближение локальной плазменной частоты, связанной с локальной электронной плотностью в атоме. В работе Виноградова и Толстихина [7] на основе решения кинетического уравнения Власова показано, что подход [6] не учитывает поляризационного поля, индуцированного внешним возмущением на атом. Однако расхождение этих подходов для сечения фотопоглощения находится в пределах точности расчетов радиационных потерь в сложных атомах (ионах). Ниже использованы оба указанных приближения.

В основе настоящего подхода лежит представление атомной структуры как системы плазменных осцилляторов, возбуждаемых столкновениями с внешними электронами плазмы. Взаимодействие электронов плазмы с атомами рассматривается в приближении эквивалентных фотонов Ферми [8]. В нем элек-

¹⁾e-mail: demura45@gmail.com

трическое поле потока эквивалентных фотонов определяется фурье-разложением амплитуды электрического поля электрона, движущегося по классической траектории в поле возбуждаемого иона. В такой постановке возбуждение связанных электронов в многозарядном ионе выражается через сечение фотопоглощения. Для последнего, в свою очередь, могут использоваться указанные выше статистические модели тяжелых атомов [6, 7].

Одним из важных общих свойств атомных систем является очевидная связь эффективных атомных сил осцилляторов f_{ij} с распределением атомной или ионной электронной плотности $n(r)$:

$$f_{ij} = 4\pi n(r)r^2 dr, \quad (1)$$

которая обеспечивает выполнение известного правила сумм [9].

В рамках приближения локальной плазменной частоты [6] сложный ион представляется системой эквивалентных осцилляторов, частоты которых определяются значениями локальной плазменной частоты $\omega_p(r)$ согласно известной формуле (атомные единицы):

$$\omega_p(r) = \sqrt{4\pi n(r)}. \quad (2)$$

Как показывает анализ, для рассматриваемых ниже приложений выполняются условия корональной модели, в рамках которой радиационные потери целиком определяются скоростями возбуждения ионов. Поэтому в рамках указанных приближений радиационные потери энергии в расчете на один электрон и данный ион тяжелой примеси (с фиксированным значением q) приобретают универсальную форму, выраженную через скорости фотовозбуждения атома в поле эквивалентных фотонов:

$$\begin{aligned} Q_{\text{abs}}/n_e &= Z \left(\frac{2Ry\omega_a}{a_0^2} \right) \times \\ &\times \int_0^{I_Z/Z\hbar\omega_a} d(\omega/\omega_a Z) \sigma_{\text{photo}}(\omega/\omega_a Z) \times \\ &\times \left\{ \frac{\langle dI^{(\text{Coulomb})}[Z(\omega/\omega_a Z)] \rangle_E}{n_e(2Ry\omega_a/a_0^2)d(\omega/\omega_a)} \right\} = \\ &= (a_0^3)(2Ry\omega_a) \left(\frac{c\hbar}{e^2} \sqrt{\frac{1}{6\pi}} \right) \sqrt{\frac{2Ry}{T}}(Z) \times \\ &\times \int_0^{I_Z/Z \cdot 2Ry} ds [\sigma_{\text{photo}}(s)/a_0^2] \times \end{aligned}$$

$$\times \int_{Z(2Ry/T)s}^{\infty} du e^{-u} g \left\{ \left[\frac{Z_{\text{eff}}Z}{2\sqrt{2}} \left(\frac{2Ry}{T} \right)^{3/2} \right] su^{-3/2} \right\}, \quad (3)$$

где a_0 – радиус Бора, $\omega_a = 2Ry/\hbar$, c – скорость света, e – заряд электрона, I_Z – потенциал ионизации иона, $\sigma_{\text{photo}}(x)$ – сечение фотопоглощения иона, $g(z)$ – так называемый гаунт-фактор, описывающий искривление траектории электрона в кулоновском поле, $\langle dI^{(\text{Coulomb})}[Z(\omega/\omega_a Z)] \rangle_E$ – интенсивность потока эквивалентных фотонов с частотой ω в единичном частотном интервале, усредненная по энергиям налетающего электрона E в предположении кулоновских траекторий электронов, рассеиваемых мишенью. Здесь движение налетающего электрона в потенциале Томаса–Ферми аппроксимировано его движением в кулоновском потенциале с некоторым эффективным зарядом Z_{eff} . Это позволяет выразить интенсивность эквивалентных фотонов через гаунт-фактор в кулоновском потенциале. При этом в модели плазменной частоты данный эффективный заряд определяется из условия равенства потенциала Томаса–Ферми и локального потенциала Кулона в точке $r_\omega = r_{\text{TF}}x_\omega$ (где r_{TF} – радиус Томаса–Ферми), отвечающей условию резонанса поглощаемой (ω) и плазменной ($\omega_p = \sqrt{4\pi n(r_\omega)} = \omega$) частот. Учитывая связь между плотностью и потенциалом в модели Томаса–Ферми, для эффективного заряда получаем выражение

$$Z_{\text{eff}} = Z \left[\chi(r_\omega) + \frac{qr_\omega}{r_0} \right], \quad (4)$$

где qZ – заряд иона, r_0 – расстояние от положения ядра, на котором в модели Томаса–Ферми электронная плотность иона с конечным зарядом обращается в нуль, $\chi(x, q)$ – известная функция, определяющая поведение потенциала и плотности для иона с зарядом ядра Z и степенью обдирки q в модели Томаса–Ферми [5]. Величина Z_{eff} плавно меняется от заряда иона при малых частотах до заряда ядра при больших частотах. Такое изменение для иона вольфрама с зарядом 22 показано на рис. 1.

Интегрирование по частотам проводится до потенциала ионизации данного иона, что соответствует учету возбуждения только связанных состояний. Интегрирование по энергии налетающего электрона проводится от частоты эквивалентного фотона, что отвечает порогам возбуждения атомных переходов в статистической модели. Сечения фотовозбуждения выбираются ниже в соответствии с моделями [6, 7].

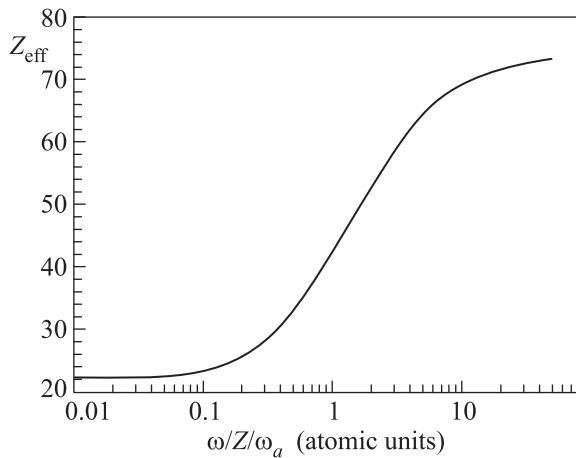


Рис. 1. Эффективный заряд в модели Томаса–Ферми, вычисленный по формуле (4), в зависимости от частоты для иона W^{22+}

Величина гаунт-фактора в кулоновском приближении равна [10]

$$q(\nu) = \frac{\pi\sqrt{3}}{4} \left[i\nu H_{i\nu}^{(1)'}(i\nu) H_{i\nu}^{(1)}(i\nu) \right] \approx \frac{\sqrt{6}}{\pi} \ln \left[\left(\frac{2}{\gamma\nu} \right)^{1/\sqrt{2}} + e^{\pi/\sqrt{6}} \right], \quad (5)$$

где $H_p^{(1)}(z)$, $H_p^{(1)'}(z)$ – функция Ханкеля и ее производная по аргументу, $\gamma \approx 1.78$ – постоянная Эйлера.

Если пренебречь изменением гаунт-фактора, то

$$\frac{Q_{\text{abs}}}{n_e} = (a_0^3)(2Ry\omega_a) \left(\frac{c\hbar}{e^2} \sqrt{\frac{1}{6\pi}} \right) \sqrt{\frac{2Ry}{T}}(Z) \times \int_0^{I_Z/Z \cdot 2Ry} ds [\sigma_{\text{photo}}(s)/a_0^2] \exp \left[-Z \left(\frac{2Ry}{T} \right) s \right]. \quad (6)$$

Для расчета полных радиационных потерь на всех ионах при данной температуре необходимо просуммировать выражения (3), (6) по равновесному ионизационному распределению при этой температуре [11].

В конкретных расчетах использовались две статистические модели для сечений фотопоглощения: модель локальной плазменной частоты (*Local Plasma Frequency*, LPF) [6] и электродинамическая модель (ЕМ) [7].

В приближении локальной плазменной частоты [6] сечение фотопоглощения записывается в виде

$$\sigma_{\text{abs}}(\omega) = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \int d^3r n(r) \delta[\omega - \omega_p(r)] =$$

$$= \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \cdot 4\pi \left[r_\omega^2 \frac{n(r_\omega)}{|d\omega_p(r)/dr|_{r=r_\omega}} \right], \quad (7)$$

где m – масса электрона.

Если воспользоваться моделью Томаса–Ферми для электронной плотности в атоме, то формулы (6), (7) преобразуются к виду

$$Q_{\text{abs}}/n_e = (a_0^3)(2Ry\omega_a) \left(\frac{3\pi^4}{16} \sqrt{\frac{1}{6\pi}} \right) \sqrt{\frac{2Ry}{T}}(Z) \times \int_0^{I_Z/Z \cdot 2Ry} ds s \frac{x_s^2 \chi(x_s, q)/|\chi'(x_s, q)|}{|1 - [\chi(x_s, q)/x_s \chi'(x_s, q)]|} \times \int_{Z(2Ry/T)s}^\infty du e^{-u} g \left\{ \left[\frac{Z_{\text{eff}} Z}{2\sqrt{2}} \left(\frac{2Ry}{T} \right)^{3/2} \right] su^{-3/2} \right\}, \quad (8)$$

а для $g(z) = 1$ имеем

$$\frac{Q_{\text{abs}}}{n_2} = (a_0^3)(2Ry\omega_a) \left(\frac{3\pi^4}{16} \sqrt{\frac{1}{6\pi}} \right) \sqrt{\frac{2Ry}{T}} Z \times \int_0^{I_Z/Z \cdot 2Ry} ds s \frac{x_s^2 [\chi(x_s, q)/|\chi'(x_s, q)|]}{|1 - [\chi(x_s, q)/x_s \chi'(x_s, q)]|} \times \exp \left[-Z \left(\frac{2Ry}{T} \right) s \right]. \quad (9)$$

Для электродинамической модели подставлялись сечения фотопоглощения из работы [7].

Результаты расчетов показаны на рис. 2. Здесь приведен вклад в радиационные потери только от возбуждения атомов электронами плазмы, описываемыми в приближении эквивалентных фотонов Ферми. Вклад радиационной рекомбинации оказывается малым в силу преобладания столкновительного возбуждения остова ионов, обладающих достаточно большим количеством электронов, над радиационной рекомбинацией даже при высоких значениях температуры. Что касается диэлектронной рекомбинации, то ее вклад рассчитывался на основе комбинации известной формулы Берджесса [16] и статистического подхода, позволяющего выразить силы осцилляторов и энергии переходов в этой формуле через электронную плотность в атоме. Расчеты показывают, что вклад диэлектронной рекомбинации составляет не более 10% во всей области изменения температур. Поэтому его можно не учитывать в рамках точности самой статистической модели. На рис. 2 представлены также результаты расчетов радиационных потерь известными численными кодами [2, 3,

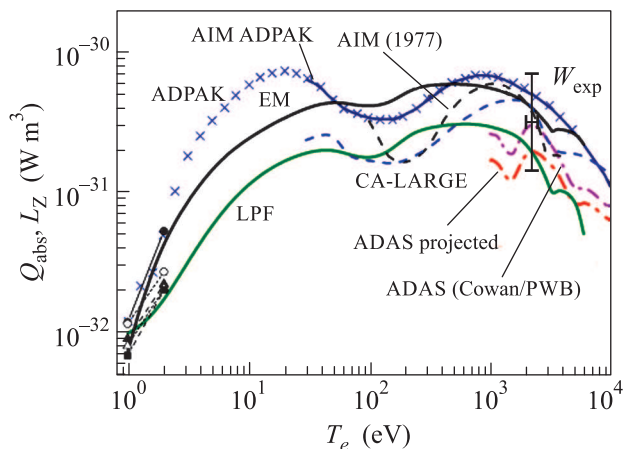


Рис. 2. Сравнение функций радиационных потерь примеси вольфрама в универсальном статистическом подходе (EM – электромагнитный метод, LPF – метод локальной плазменной частоты) с результатами известных кодов: ADPAK [2], AIM ADPAK [3], AIM (модель среднего иона) [13], ADAS (прогноз) [3, 14], ADAS COWAN/PWB [3, 14], CA-LARGE [16]; темные кружки – ADPAK, светлые – CFG-AVE, темные треугольники – FS-NOCI, светлые – FS-CI, темные квадраты – FS-FOM-данные радиационно-столкновительных моделей из [17]), в зависимости от температуры плазмы; E_{exp} – экспериментальные оценки величины радиационных потерь [16]

13–17]. Видно, что различие результатов этих численных расчетов оказывается того же порядка величины, что и для статистических моделей. Наибольшее различие с численными расчетами наблюдается в области низких температур, где становится существенным возбуждение внешней оболочки ионов, для которых использование статистической модели уже оказывается проблематичным. В то же время интересным обстоятельством является достаточно хорошее соответствие результатов детальных численных расчетов [17] и результатов, полученных с помощью статистической модели, для минимальных температур (1–2 эВ).

Таким образом, результаты данной работы являются первым опытом применения статистических моделей для расчета радиационных потерь плазмы на тяжелых примесях. Показано, что результаты универсального статистического подхода находятся в пределах разброса данных известных численных кодов [2, 3, 13–17], использующих различные приближения для атомной структуры и сечения электронного возбуждения сложных ионов. Дальнейшее развитие метода может состоять в учете оболочечных эффектов [18], проявляющихся на периферии распределения атомной электронной плотности.

Развитый в работе универсальный статистический подход к анализу и расчету радиационных потерь исходит из первых принципов статистической теории. При этом все атомные характеристики выражены через распределение электронной плотности в атоме. Правило сумм (сохранение суммы сил осцилляторов переходов) является существенным условием последовательной реализации общей идеи статистического подхода.

Метод коллективных возбуждений атомов, используемый в данной работе для расчетов радиационных потерь плазмы, представляет общезначимый интерес. Прикладное же значение настоящей статьи состоит в разработке статистического метода расчета радиационных потерь плазмы на сложных атомах, позволяющего получить необходимые данные значительно быстрее и с меньшими затратами вычислительных ресурсов.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ #13-02-00812 и гранта НШ-3328.2014.2 Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ.

1. M. Groth, S. Brezinsek, P. Belo, M. N. A. Beurskens, M. Brix, M. Clever, J. W. Coenen, C. Corrigan, T. Eich, J. Flanagan, C. Guillemaut, C. Giroud, D. Harting, A. Huber, S. Jachmich, U. Kruezi, K. D. Lawson, M. Lehnen, C. Lowry, C. F. Maggi, S. Marsen, A. G. Meigs, R. A. Pitts, G. Sergienko, B. Sieglin, C. Silva, A. Sirinelli, M. F. Stamp, G. J. van Rooij, and S. Wiesen, *Nucl. Fusion* **53**, 093016 (2013).
2. H. P. Summers, *ADAS users manual*, JET-IR 06, Abingdon: JET Joint undertaking (1994).
3. D. Post, J. Abdallah, R. E. H. Clark, and N. Putvinskaya, *Phys. Plas.* **2**, 2328 (1995).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики*, Т. III, Физматлит, М. (1974); *Курс теоретической физики*, Т. IX, Физматлит, М. (1978).
5. П. Гамбош, *Статистическая теория атома и ее применения*, ИЛ (1951).
6. W. Brandt and S. Lundqvist, *Phys. Rev.* **139**(3A), 612 (1965).
7. А. В. Виноградов, О. И. Толстихин, *ЖЭТФ* **96**, 1204 (1989).
8. E. Fermi, *Zeit. fur Physik* **29**, 315 (1924).
9. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, М. (1960).
10. V. I. Kogan, A. B. Kukushkin, and V. S. Lisitsa, *Phys. Rep.* **213**, 1 (1992).
11. K. Asmussen, K. B. Fournier, J. M. Laming, J. F. Seely, R. Dux, W. Engelhardt, and J. C. Fuchs, *Nucl. Fusion* **38**, 967 (1998).

12. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, Физматлит, М. (1979).
13. D. E. Post, R. V. Jensen, C. B. Tarter, W. H. Grasberger, and W. A. Lokke, *Data and Nucl. Data Tables* **20**, 397 (1977).
14. R. Neu, R. Dux, A. Kallenbach, T. Putterich, M. Balden, J. C. Fuchs, A. Herrmann, C. F. Maggi, M. O'Mullane, R. Pugno, I. Radivojevic, V. Rohde, A. C. C. Sips, W. Suttrop, and A. Whiteford, *Nucl. Fusion* **45**, 209 (2005).
15. V. M. Leonov and V. E. Zhogolev, *Plasma Phys. Control. Fusion* **47**, 903 (2005).
16. T. Putterich, R. Neu, R. Dux, A. D. Whiteford, M. G. O'Mullane, and H. P. Summers, *Nucl. Fusion* **50**, 025012 (2010).
17. J. Abdallah Jr., J. Colgan, R. E. H. Clark, C. J. Fontes, and H. L. Zhang, *J. Phys. B* **44**, 075701 (2011).
18. В. Я. Карпов, Г. В. Шпатаковская, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 389 (2013).