

УДК 533.92

СОПОСТАВЛЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РАСЧЁТА СКОРОСТИ ДИЭЛЕКТРОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ НА ТЯЖЁЛЫХ ПРИМЕСЯХ В ТЕРМОЯДЕРНОЙ ПЛАЗМЕ

Д.С. Леонтьев

НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Произведён расчёт скорости диэлектронной рекомбинации тяжёлых ионов, в том числе вольфрама, в термоядерной плазме в рамках статистической модели атома. Данная модель основана на представлении многоэлектронного иона как системы эквивалентных осцилляторов, колеблющихся с плазменными частотами, определяемыми распределением плотности электронов в атоме или ионе. В расчётах использовались распределения плотности электронов, рассчитанные в приближении Томаса—Ферми в двух вариантах: с учётом орбитального строения электронных оболочек и суммарная по орбитальному моменту плотность. Статистическая модель позволяет значительно упростить расчёты скорости диэлектронной рекомбинации.

Ключевые слова: физика плазмы, диэлектронная рекомбинация, тяжёлые ионы.

COMPARISON OF STATISTICAL MODELS FOR CALCULATIONS OF HEAVY IMPURITY DIELECTRONIC RECOMBINATION RATES IN THERMONUCLEAR FUSION PLASMAS

D.S. Leontyev

NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia

The dielectronic recombination rate on heavy ions, including tungsten, in thermonuclear fusion plasmas is calculated using the statistical model of atoms. This model is based on idea of a representation of multielectron ion as a system of equivalent oscillators, which have plasma frequencies determined by the electron density distribution in an atom or an ion. For calculations we used the electron density distribution described by the Thomas—Fermi model in two variants: the first one took into account the electron shell structure of ion, and the second one was summarized over orbital quantum number density. The statistical models allow to substantially simplify the calculations of the dielectronic recombination rate.

Key words: plasma physics, dielectronic recombination, heavy ions.

DOI: 10.21517/0202-3822-2017-40-2-19-22

ВВЕДЕНИЕ

В современных термоядерных установках используется вольфрам в качестве конструкционного материала диверторных пластин. Из-за большого зарядового числа даже в условиях термоядерной плазмы примесные ионы вольфрама сохраняют большое число электронов, что сильно усложняет расчёт радиационно-столкновительных процессов электронов с тяжёлыми ионами примеси. Более ранние расчёты скорости диэлектронной рекомбинации для тяжёлых ионов показывали существенное разногласие с экспериментальными данными [1, 2]. Кроме того, в настоящее время не существует единой универсальной базы скорости диэлектронной рекомбинации для большинства ионов в широком диапазоне электронных температур. В настоящей работе предпринята попытка использовать статистическую модель для универсального описания процесса диэлектронной рекомбинации тяжёлых примесных ионов в термоядерной плазме. Для проверки модели проведено сравнение с результатами численного расчёта никелеподобной последовательности широкого класса тяжёлых элементов Ag, Xe, Gd, Pr, Ta, W, Au.

Ранее статистическая модель успешно применялась в работе [3] по расчёту сечений и скоростей ионизации и радиационных потерь в столкновительно-излучательных процессах с многоэлектронными ионами в плазме. Кроме того, статистическая модель использовалась и для расчёта скорости диэлектронной рекомбинации применительно к полуэмпирической формуле Берджесса—Мертса в работе [4]. Сравнение с точными квантово-механическими расчётами показало, что формула Берджесса—Мертса даёт завышенные результаты. Далее предлагается использовать статистические модели, как учитывающие оболочечное строение иона, так и не учитывающие её.

Диэлектронная рекомбинация является одним из эффективных каналов рекомбинации тяжёлых примесных ионов в термоядерной плазме. Он играет важную роль в установлении ионизационного равновесия в

плазме [5]. Это сложный процесс, на первом этапе которого происходит захват свободного электрона ионом и одновременное возбуждение одного электрона иона (чаще всего с внешней оболочки). Далее из получившегося дважды возбуждённого состояния есть два канала распада: автоионизационный, при котором электрон возвращается в непрерывный спектр, другой электрон сваливается в одно из связанных состояний, и радиационный канал распада, в процессе которого захваченный электрон испускает энергию и переходит на более низкий уровень. Эти процессы являются конкурирующими, и скорость диэлектронной рекомбинации определяется соотношением между скоростями автоионизационного и радиационного каналов распада. Для расчётов скоростей этих распадов нужно знать энергии переходов и силы осцилляторов для каждого уровня. Число таких уровней велико, что сильно затрудняет расчёты. Поэтому для вычисления скоростей диэлектронной рекомбинации применяют различные упрощённые модели. Одной из таких моделей является статистическая модель, согласно которой многоэлектронный ион представляется как система осцилляторов, колеблющихся с плазменными частотами, которые зависят от распределения плотности электронов ионного остова [6]:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n(r)}{m}}, \quad (1)$$

где e , m — заряд и масса электрона; $n(r)$ — электронная плотность. В настоящей работе сравниваются расчёты скоростей диэлектронной рекомбинации, где в качестве электронной плотности использована плотность в модели Томаса—Ферми [7]:

$$n(x, q, Z) = Z^2 \frac{32}{9\pi^3} \left(\frac{\chi(x, q)}{x} \right)^{3/2}, \quad (2)$$

где q — степень ионизации иона; Z — заряд ядра; χ — функция Томаса—Ферми.

В другой модели учитываются строение электронных оболочек и зависимость от орбитального момента электронов остова L [8]:

$$n_L(r) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{2L+1}{r^2} \sqrt{-2V_L}, \quad (3)$$

где V_L — эффективный потенциал, являющийся суммой потенциала Томаса—Ферми V и центробежного потенциала:

$$V_L = V + \frac{(L+1/2)^2}{2r^2}. \quad (4)$$

ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ СКОРОСТИ ДИЭЛЕКТРОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

Основная формула диэлектронной рекомбинации [9]

$$Q^{dr}(T) = \left(\frac{4\pi Ry}{T} \right)^{3/2} a_0^3 \sum_{i,f,n,l} \frac{g_f}{g_i} W_R(i, f) \exp\left(-\frac{\hbar\omega_{if}}{T} + \frac{Z_i^2 Ry}{n^2 T} \right) \frac{W_A(i, f, n, l)}{W_R(i, f) + W_A(i, f, n, l)}, \quad (5)$$

где T — температура электронов; $2Ry$ — энергетическая единица Ридберга; a_0 — боровский радиус; $g_{i,f}$ — статистические веса начального (i) и конечного (f) состояний электронного остова иона; W_R — вероятность радиационного перехода внутри электронного остова иона; W_A — скорость автоионизационного распада дважды возбуждённого атомного энергетического уровня; ω_{if} — частота перехода электронного остова; n, l — главное квантовое число и орбитальный момент захваченного электрона соответственно. Для рассматриваемой последовательности никелеподобных ионов диэлектронный захват происходит на нижние энергетические уровни, близкие к основному состоянию. Поскольку высоковозбуждённые состояния не возбуждаются, статистические веса этих состояний в формуле (5) не учитываются.

Скорость радиационного распада W_R можно выразить через силы осцилляторов f_{fi} и частоту переходов ω_{if} (c — скорость света):

$$W_R(i, f) = \frac{2\omega_{if}^2 f_{fi}}{c^3}. \quad (6)$$

Автоионизационный распад является обратным процессом к возбуждению электрона. Соотношение между ними удовлетворяет распределению Саха для ионов $X^{(k+1)+}$ и X^{k+} для случая, когда $W_R = 0$ [10]. Таким образом, можно получить

$$(2l+1)g_f W_A(i; f, n, l) = Z_i^2 n^{-3} \omega_{if} g_i \sigma_{\text{exc}}(l) / \pi^2 a_0^2, \quad (7)$$

где Z_i — заряд иона; σ_{exc} — сечение возбуждения электрона в остоле иона. Для сечения была взята квазиклассическая формула

$$\sigma_{\text{exc}}(l) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{\hbar}{mv_e} \right)^2 \frac{g_f}{g_i} f_{fi} Z_i^{-2} (l+1/2)^2 G \left(\frac{\omega_{if} (l+1/2)^3}{3Z_i^2} \right), \quad (8)$$

где функция $G(u)$ выражается через функции Макдональда $K_{1/3}(u)$ и $K_{2/3}(u)$ [9]:

$$G(u) = u(K_{1/3}^2(u) + K_{2/3}^2(u)). \quad (9)$$

Для упрощения расчётов было проведено усреднение скорости автоионизационного распада по орбитальному квантовому числу l захваченного электрона:

$$\langle W_A(n) \rangle = \frac{4 \cdot 1,7 f_{fi} Z_i^2}{3\pi n^5 \omega_{if}}. \quad (10)$$

Из закона сохранения энергии имеем $\omega_{if} = \omega_p$. После подстановки полученных выражений в формулу (5) и перехода от суммирования к интегрированию получаем следующие выражения для расчёта скорости диэлектронной рекомбинации, модели Томаса—Ферми:

$$Q^{dr}(\text{см}^3/\text{с}) = a_0^3 \omega_a Q^{dr}(\text{а.е.м.});$$

$$Q^{dr}(\text{а.е.м.}) = \frac{0,86 \cdot 10^2}{T^{3/2}} \left(\frac{Z}{Z_i} \right)^2 \int_0^{x_0} dx x^2 \left(\frac{\chi(x, q)}{x} \right)^{9/4} \int_1^\infty dt \frac{\exp \left[-\frac{1,2Z}{T} \left(\frac{\chi(x, q)}{x} \right)^{3/4} \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) \right]}{t^5 + A(x)}, \quad (11)$$

$$A(x) = \frac{4,56 \cdot 10^6}{Z_i^3 \sqrt{Z} \left(\frac{\chi(x, q)}{x} \right)^{3/8}},$$

где a_0 — боровский радиус; ω_a — атомная частота.

В модели, учитывающей орбитальное строение атома, получаем

$$Q^{dr}(\text{см}^3/\text{с}) = a_0^3 \omega_a \sum_L (2L+1) Q_L^{dr}(\text{а.е.м.});$$

$$Q_L^{dr}(\text{а.е.м.}) = \left(\frac{2\pi}{T} \right)^{3/2} \frac{1,7 \cdot 64}{3Z_i^2} r_{\text{TF}}^3 \int_{x_{\text{min}}}^{x_{\text{max}}} dx x^2 n_L(x) \omega_{p,L}(x) \int_1^\infty dt \frac{\exp \left[-\frac{\omega_{p,L}}{T} \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) \right]}{t^5 + A(x, L)}, \quad (12)$$

$$\omega_{p,L} = \sqrt{4\pi n_L(x)};$$

$$A(x, L) = \frac{5,2 \cdot 10^6}{Z_i^3 \sqrt{\omega_{p,L}(x)}},$$

где функция $A(x)$ или $A(x, L)$ — отношение скорости автоионизационного распада W_{An}^5 к скорости радиационного W_R — определяющий фактор диэлектронной рекомбинации.

РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1—3 представлено сравнение результатов расчётов скорости диэлектронной рекомбинации по статистическим моделям (11) и (12), а также сравнение с данными квантово-механических расчётов кодами HULLAC [11] и FAC [12], учитывающих точную структуру атомных уровней. Как видно на рисунках, модели не сильно расходятся друг с другом и дают хорошее совпадение с квантово-механическими расчётами.

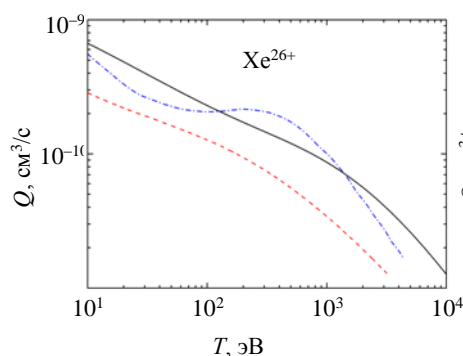


Рис. 1. График зависимости скорости диэлектронной рекомбинации от температуры для иона Xe^{26+} : — расчёт по формуле (11); - - - расчёт по формуле (12); - · - · - расчёты кодом HULLAC [11]

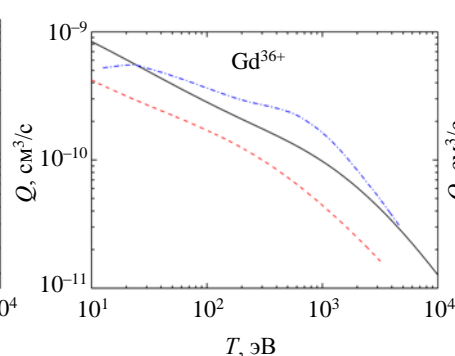


Рис. 2. График зависимости скорости диэлектронной рекомбинации от температуры для иона Gd^{36+} : — расчёт по формуле (11); - - - расчёт по формуле (12); - · - · - расчёт кодом HULLAC [11]

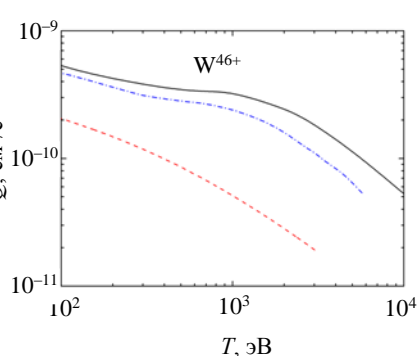


Рис. 3. График зависимости скорости диэлектронной рекомбинации от температуры для иона W^{46+} : — расчёт по формуле (11); - - - расчёт по формуле (12); - · - · - расчёт кодом FAC [12]

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработаны статистические модели атома для расчёта скорости диэлектронной рекомбинации для тяжёлых примесных ионов в термоядерной плазме. Эти модели позволяют упростить вычисление скорости процесса, значительно уменьшают время расчёта, позволяют универсально описать атом или ион любого химического элемента с различным зарядом ядра. В итоге использование статистической модели атомов позволяет создать базы данных для скорости диэлектронной рекомбинации большинства ионов вольфрама и других тяжёлых ионов в термоядерной плазме и дальнейшее её использование для прикладных задач управляемого термоядерного синтеза. Сравнение результатов расчётов скорости диэлектронной рекомбинации по этим моделям с результатами квантово-механических расчётов, использующих точную структуру атомных уровней, даёт хорошее согласие.

Автор выражает благодарность В.С. Лисице, А.В. Демуре и В.А. Шурыгину за ценные советы и рекомендации в разработке и применении статистической модели.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schippers S., Bernhardt D., Müller A. et al. — Phys. Rev. A, 2011, vol. 83, p. 012711.
2. Badnell N., Balance C., Griffin D., O'Mullane M. — Phys. Rev. A, 2012, vol. 85, p. 052716.
3. Demura A.V., Kadomtsev M.B., Lisitsa V.S., Shyrigin V.A. — HEDP, 2015, vol. 15, p. 49—58.
4. Lisitsa V.S., Leontyev D.S. — CPP, 2016, vol. 56, p. 849—854.
5. Burgess A. — Astrophysical J., 1964, vol. 139, p. 776—780.
6. Brandt W., Lundqvist S. — Phys. Rev. A, 1965, vol. 139, p. 612—617.
7. Гамбош П. Статистическая теория атома и ее применения. — М.: Изд-во иностр. лит., 1951.
8. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. — М.: Наука, 1975.
9. Bureyeva L.A., Kato T., Lisitsa V.S., Namba C. — Phys. Rev. A, 2002, vol. 65, p. 032702.
10. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. — М.: Наука, 1979.
11. Behar E., Mandelbaum P., Schwob J.L. — Phys. Rev. A, 1996, vol. 54, p. 3070—3077.
12. Wu Z., Fu Y., Ma X., Li M., Xie L., Jiang J., Dong C. — Atoms, 2015, vol. 3, p. 474.



Дмитрий Сергеевич Леонтьев, аспирант; НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1, Россия
leontievdmity@gmail.com

Статья поступила в редакцию 19 января 2017 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Термоядерный синтез, 2017, т. 40, вып. 2, с. 19—22.