

Entwicklung eines Werkzeugs zur Modellierung der Nettoerosion im Hauptraum der Brennkammer eines Tokamaks und Studium der Plasma-Wand-Wechselwirkung an DEMO1

Mitja Beckers

Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 414

ISBN 978-3-95806-307-5

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Energie- und Klimaforschung
Plasmaphysik (IEK-4)

Entwicklung eines Werkzeugs zur Modellierung der Nettoerosion im Hauptraum der Brennkammer eines Tokamaks und Studium der Plasma-Wand-Wechselwirkung an DEMO1

Mitja Beckers

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 414

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-307-5

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek.
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte Bibliografische Daten
sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Herausgeber und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralbibliothek, Verlag
52425 Jülich
Tel.: +49 2461 61-5368
Fax: +49 2461 61-6103
zb-publikation@fz-juelich.de
www.fz-juelich.de/zb

Umschlaggestaltung: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Druck: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Copyright: Forschungszentrum Jülich 2018

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 414

D 61 (Diss., Düsseldorf, Univ., 2017)

ISSN 1866-1793
ISBN 978-3-95806-307-5

Vollständig frei verfügbar über das Publikationsportal des Forschungszentrums Jülich (JuSER)
unter www.fz-juelich.de/zb/openaccess.



This is an Open Access publication distributed under the terms of the [Creative Commons Attribution License 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Abstract

Thermonuclear fusion is a promising concept for safe, sustainable, environmental friendly and expandable electricity production on earth. DEMO1 is the working title of a *European demonstration power plant*, which is being developed and foreseen to be operated by the year 2050. The *early design phase* lasts until 2021. According to the current *baseline scenario*, DEMO1 will be a tokamak with two hours of pulse duration and five hundred megawatts of electrical output power.

Design points, i.e. an optimized set of machine and plasma parameters, are obtained by fast 0.5d reactor *system codes* that constrain the parametric space by physics- and technology-limits. Aspects of *plasma-wall-interaction* in the main chamber have not yet been included into such codes. Well established and sophisticated codes for plasma edge modeling such as EIRENE (neutral particle kinetics), B2 (plasma dynamics) and ERO (eroded wall material) have so far been unavailable and incompatible with system modeling.

One major scientific goal of this thesis was the development of a tool, for a description of the stationary global net erosion of a tungsten-armored first-wall in the main chamber of a fusion reactor, that allows inclusion in system modeling. Another goal was the identification of plasma edge parameters for the current DEMO1 baseline scenario, yielding acceptable erosion rates.

For feasibility it was demanded, that at least ninety percent of the plasma-facing, protective, pure-tungsten-layer must persist the erosion by impinging ions and atoms during the scheduled time-of-operation of the starter- and follow-up blanket.

For a calculation of the neutral particle kinetics and the wall-sputtering by fuel neutrals, the 1d monte-carlo CELLSOR-code was developed and benchmarked with the EIRENE-code, i.e. the european tool for modeling of the ITER-divertor. CELLSOR solves kinetic equations in a 7d phase space with a 1d plasma description and physical rate coefficients for atomic and molecular interactions. CELLSOR calculates the angle- and energy-dependent sputter yields at wall-incidence. For modelling of plasma fuelling, a new pellet ablation model was developed. The CELLSOR ERO extension was developed for calculations of prompt redeposition and self-sputtering of eroded tungsten atoms.

Particle balance within the *scrape-off-layer* (SOL) was calculated by an analytic solution of the continuity equation in a 1.5d fluid description with an iterative algorithm for coupling to the results of the kinetic solution. The required external fuelling flux was calculated from flux balance equations at the boundary between the confined core and the SOL.

For calculations of the damage by ions, i.e. fuel (D,T), *ash* (He), *seeding gas* (N) and eroded surface material (W), a 0d sheath-approximation model was developed.

With these tools, the global net erosion was calculated for distinguished testcases for variations of the size of the wall clearance and for both, diffusive and convective transport perpendicular to the magnetic field lines. The testcases were mainly differing in the pedestal pressure, i.e. density and temperature, and the separatrix density levels.

It was shown, that on DEMO1, other than on present tokamaks, the damage of the first-wall was almost completely due to light fuel neutrals, which were released towards the first-wall by charge exchange (CX) collisions in the hot pedestal region, due to the strong external fuelling of the core edge plasma. On the contrary, the ion damage was sufficiently reduced by a wall clearance of a few centimetres.

The pedestal densities were limited by the upper *greenwald-limit* at the top and by a minimum requirement at the separatrix allowing *divertor detachment*, which is the key for a feasible power exhaust scenario.

It was shown, that the erosion rate of the first-wall was most sensitive to the pedestal densi-

ty and -temperature, i.e. the energy-distribution of released pedestal-neutrals. It was further shown, within the defined range of testcases, that the (back-)screening capability of the SOL was insufficient for a protection against neutrals with energies of at least kilo eV, except for a special stellarator-testcase without presence of an upper density-limit.

In order to reduce the global net erosion below acceptable levels, even for the follow-up blanket of DEMO1, it was shown, that pedestal-densities above or at the *greenwald-density* were necessary, allowing reduced pedestal temperatures and increasing the screening capability of the pedestal itself.

However, for plasma diagnostic and control purposes, a lower density with a fifteen percent margin to the density limit would be favorable for DEMO1. Further analysis with reduced energy confinement and pedestal pressure, i.e. by 31% compared to the *baseline scenario*, revealed that such a case was showing tolerable erosion rates, i.e. $\leq 40 \mu\text{m}$ tungsten per full-power year. Therefore, a different set of plasma shaping parameters with reduced elongation and triangularity was suggested.

Kurzzusammenfassung

Kontrollierte thermonukleare Kernfusion stellt eine vielversprechende Option zur sicheren, nachhaltigen, umweltfreundlichen und skalierbaren irdischen Stromerzeugung dar. DEMO1 bezeichnet das europäische Konzept eines *Demonstrationskraftwerks*, welches planmäßig im Jahr 2050 in Betrieb genommen werden soll. Die *Frühdesignphase* endet im Jahr 2021. Das aktuelle *Baseline Scenario* sieht für DEMO1 einen Tokamak mit einer Plasmapulsdauer von 2 h sowie einer elektrischen Ausgangsleistung von 500 MW vor.

Designpunkte, i.e. optimierte Sätze von Maschinen- und Plasmaparametern, werden mit Hilfe von schnellen 0,5-d Reaktor-*Systemcodes* berechnet. Diese beschränken den Parameterraum durch physikalische und technologische Randbedingungen. Aspekte der *Plasma-Wand-Wechselwirkung* (PWW) im Hauptraum der Brennkammer wurden dabei bisher ausgeklammert. Etablierten und detaillierten Codes zur Modellierung der Plasmarandschicht, wie EIRENE (Neutralteilchenkinetik), B2 (Plasmodynamik) und ERO (erodiertes Wandmaterial), mangelt es an Verfügbarkeit und Kompatibilität zur Systemmodellierung.

Ein Ziel dieser Arbeit stellte die Entwicklung eines zu Systemcodes kompatiblen Werkzeuges dar, zur Modellierung der stationären globalen Nettoerosion einer mit Wolfram beschichteten ersten Wand im Hauptraum eines Tokamaks. Ein weiteres Ziel umfasste das Auffinden von Parametern der Plasmarandschicht, die zu akzeptablen Erosionsraten der ersten Wand für das *Baseline Scenario* von DEMO1 führen.

Als Kriterium für eine hinreichende Lebensdauer wurde gefordert, dass höchstens zehn Prozent der potentiellen Wolframschicht der ersten Wand durch Zerstäubung durch aufprallende Ionen und Atome abgetragen werden, innerhalb der für das Start- und Nachfolge-Blanket vorgesehenen Betriebsdauer.

Zur Berechnung der Neutralteilchenkinetik und der Zerstäubung durch Brennstoffatome wurde der 1-d *Monte-Carlo* CELLSOR-Code entwickelt und mit dem EIRENE-Code gebenchmarkt. EIRENE ist das Standardwerkzeug zur Auslegung des Divertors an ITER. CELLSOR löst kinetische Gleichungen im 7-d Phasenraum. Die Plasmabeschreibung erfolgt über 1-d Profile der Dichte und Temperatur und die Reaktionsraten werden in 1-d für atomare und molekulare Interaktionen dargestellt. CELLSOR berechnet die winkel- und energieabhängigen *Zerstäubungsausbeuten* beim Wandaufprall. Zur Modellierung der Brennstoffzufuhr wurde ein neues Ablationsmodell für injizierte, gefrorene Pellets entwickelt. Die Erweiterung CELLSOR ERO wurde für Berechnungen der prompten Redeposition und Selbstzerstäubung entwickelt.

Die Teilchenbilanz in der Randschicht wurde durch eine analytische Lösung der *Kontinuitätsgleichung* in einer 1,5-d Fluidbeschreibung gewährleistet. Ferner wurde ein Algorithmus zur iterativen Kopplung der Lösungen der Fluid- und Kinetikbeschreibung entwickelt. Der notwendige wandseitige Zufluss an ext. Brennstoff wurde durch Flussbilanzgleichungen an der Grenzfläche zwischen Kernplasma und dem *Scrape-Off Layer* berechnet.

Zur Berechnung der Schädigung durch Ionen, i.e. Brennstoff (D,T), *Asche* (He), *Seeding Gas* (N) und erodiertes Wandmaterial (W), wurde ein 0-d *Schicht-Approximations-Modell* entwickelt.

Mit diesen Werkzeugen wurde die globale Nettoerosion für unterschiedliche Testfälle berechnet. Dabei wurde der mittlere *Wandabstand* der Separatrix variiert, sowie zwischen Senkrecht-Transport durch Diffusion bzw. Konvektion unterschieden. Unterschiede lagen für die Testfälle im Pedestaldruck, d.h. der Dichte und Temperatur, sowie der Separatrixdichte.

Es konnte gezeigt werden, dass der Schaden der ersten Wand an DEMO1, anders als bei heutigen Tokamaks, fast ausschließlich durch leichte Brennstoffatome hervorgerufen wurde. Diese wurden mit sehr hohen Raten im heißen Randschicht-Pedestal, durch *Ladungsaustauschstöße* mit Atomen der Pelletzufuhr, freigesetzt.

Die Schadensbeiträge durch Ionen konnten bereits durch Wandabstände einiger cm hinreichend reduziert werden.

Die Pedestaldichten wurden an der Spitze durch das obere *Greenwald-Limit* beschränkt sowie an der Separatrix durch eine Mindestanforderung zum Erreichen des *Divertor-Detachments*, dem Regime für eine optimierte Leistungsabfuhr.

Die Erosionsrate der ersten Wand zeigte eine hohe Sensitivität zur Pedestaldichte und -temperatur, i.e. der Energieverteilung der *Pedestal-Neutrals*. Die Studien zeigten ferner, dass im Parameterbereich der Testfälle keine ausreichende (Re-)Abschirmung des *Scrape-Off-Layer* gegen Pedestal-Neutrals mit Energien oberhalb von 1 keV stattfand, mit Ausnahme eines *Stellarator-falls*, i.e. ohne Existenz des Greenwald-Limits.

Zur notwendigen Reduktion der globalen Nettoerosion konnte für den Betrieb des Nachfolge-Blankets gezeigt werden, dass Pedestaldichten von mindestens der *Greenwald-Dichte* nötig waren. Diese führten zu reduzierten Pedestaltemperaturen sowie einer verbesserten Eigenabschirmung des Pedestals gegen *keV-Pedestal-Neutrals*.

Aus Gründen der Plasmadiagnostik und -kontrolle wird für DEMO1 eine 15 %-Marge zum *Greenwald-Limit* favorisiert. Es konnte gezeigt werden, dass damit akzeptable Erosionsraten erreichbar waren, durch eine Reduktion der Einschlussgüte bzw. des Pedestaldrucks im Kernplasma, um 31 % verglichen mit dem *Baseline Scenario*. Konsequenterweise wurden reduzierte Werte der Elongation und Triangularität für das Plasma-*Shaping* an DEMO1 vorgeschlagen.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Codes zur Randschichtmodellierung in Kernfusionsplasmen	7
2.1. Integrierte Systemmodellierung	8
2.2. Entwicklung des CELLSOR-Codes	9
2.2.1. Schnittstellen zwischen CELLSOR und Systemcodes	9
2.2.2. Entwicklungsschritte	10
2.3. CELLSOR-Studien zur Analyse der Wanderosion an DEMO1	10
3. Grundlagen	11
3.1. Kernfusion	11
3.1.1. Deuterium-Tritium-Reaktion	11
3.2. Plasmaphysik	12
3.2.1. Debye-Länge	13
3.2.2. Formierung der Debye-Schicht	13
3.2.3. Magnetische Vorschicht	13
3.2.4. Bohm-Kriterium	14
3.2.5. Mach-Zahl	14
3.2.6. Stoßprozesse	15
3.2.7. Transport	16
3.2.8. Betriebsmodi und -grenzen in Tokamak-Plasmen	18
3.3. Tokamak	21
3.3.1. Plasmaheizung	21
3.3.2. Geometrisches Prinzip	22
3.3.3. Flussflächengeometrie	23
3.3.4. Divertor	25
3.3.5. Radialer Aufbau	26
3.3.6. Tritium-Brutrate	27
3.4. Plasma-Wand-Wechselwirkung	28
3.4.1. Zerstäubung	28
3.4.2. Einfallswinkel beim Wandaufprall	29
3.4.3. Co- und Redeposition	30
3.4.4. Erste Wand im Hauptraum der Brennkammer	30
3.5. DEMO1-Designparameter	32
3.5.1. Betriebsfenster	33
4. Modellierung der Plasma-Wand-Wechselwirkung im Hauptraum der Brennkammer	35
4.1. Plasmabeschreibung	36
4.2. Schädigung durch Neutralteilchen: der Monte Carlo Code CELLSOR	37
4.2.1. Geometrie	37
4.2.2. Wechselwirkungen zwischen Testteilchen und Hintergrundplasma	44
4.2.3. Gewichtung von Testteilchen	48
4.2.4. Konstruktion der Testteilchenquelle	48
4.2.5. Neutralteilchendichte	52
4.2.6. Zerstäubungsausbeuten	53

4.2.7.	Statistik	53
4.2.8.	Neutralen-Abschirmung	53
4.2.9.	Zusammenfassung	54
4.3.	Schädigung durch Ionen	55
4.3.1.	Beschleunigung im elektrischen Feld der Debye-Schicht	55
4.3.2.	Ionisationsgrad und Konzentration verschiedener Ionensorten	56
4.3.3.	Wandzufluss der Brennstoff- und Verunreinigungsionen	57
4.3.4.	Zerstäubungsausbeuten	57
4.4.	Trajektorien erodierter Wandatome: der Monte Carlo Code CELLSOR ERO	58
4.4.1.	Konstruktion der Testteilchenquelle	58
4.4.2.	Wechselwirkungen zwischen Testteilchen und Hintergrundplasma	60
4.4.3.	Berechnung der prompten Redeposition	61
4.4.4.	Wolframatomdichte	61
4.4.5.	Selbsterstäubung durch $W^+ \rightarrow W$	62
4.5.	Teilchenbilanz im <i>Scrape-Off-Layer</i> (SOL)	62
4.5.1.	Analytische Lösung der Kontinuitätsgleichung im Scrape-Off-Layer	63
4.5.2.	Iterationsschema und Konvergenzkriterium	64
4.5.3.	Berechnung des Ionenflusses zur Wand	65
4.6.	Teilchenbilanz zwischen Hauptplasma und Scrape-Off-Layer	66
4.6.1.	Bestimmung der stationären Heliumkonzentration im Kernplasma	66
4.6.2.	Bestimmung des Teilchenzuflusses der externen Brennstoffzufuhr	67
4.7.	Ausblick für zukünftige Weiterentwicklungen	68
5.	Benchmark-Rechnungen der Codes CELLSOR und EIRENE	69
5.1.	Vergleichsrechnungen mit dem validierten Monte-Carlo-Code EIRENE	70
5.1.1.	Modellspezifikationen der EIRENE- und CELLSOR-Rechnungen	70
5.1.2.	Definition der Referenzfälle	71
5.1.3.	Vergleich des Atomdichteprofiles	72
5.2.	Plausibilitätskontrolle: Energie- und Winkelverteilung beim Wandaufprall	76
5.2.1.	Winkelverteilung	76
5.2.2.	Energieverteilung	76
5.3.	Zusammenfassung und Fazit	78
6.	PWW-Studien für den Hauptraum der Brennkammer	80
6.1.	Kriterium zur Bestimmung der Wandlebensdauer	80
6.2.	Elementare Randschichtparameter	80
6.3.	Mechanismen der Wandschädigung	80
6.4.	Externe Brennstoffzufuhr durch Gaseinlass bzw. Pellet-Injektion	81
6.4.1.	In der Randschicht abgepumpter Tritium-Beipass	82
6.4.2.	Auswirkungen auf die Tritium-Brutrate (TBR)	83
6.4.3.	Fazit	84
6.5.	Auswahl der Randschichtparameter	85
6.5.1.	Abschätzung der konvektiven Transportstärke	87
6.5.2.	Profil der Elektronentemperatur	88
6.6.	Routine zur Durchführung der Erosionsstudien	89
6.6.1.	CELLSOR-Rechnung ohne Ionisationsquellen	89
6.6.2.	CELLSOR-Rechnungen mit Ionisationsquellen	90
6.6.3.	Aufstellung der Teilchenbilanz im SOL	90
6.6.4.	Ermittlung der Rate an externer Brennstoffzufuhr	90

6.6.5. Annahmen für Parameter im Modell der Brennstoffzufuhr	91
6.6.6. Berechnung der prompten Redeposition	91
6.7. Diskussion der Ergebnisse der PWW-Studien	92
6.7.1. Ionendichte im SOL	93
6.7.2. Variationen des mittleren Wandabstandes der Separatrix	95
6.7.3. Variation der Pelletgröße im Niedrigdichtefall	107
6.7.4. Reduktion der Pedestaltemperatur im Niedrigdichtefall	108
6.7.5. Analyse der Abschirmung gegen Neutrale des Wandrecyclings	110
6.8. Schlussfolgerungen für DEMO1	113
6.8.1. Schadensbeiträge zur Bruttoerosion	114
6.8.2. Transportmechanismus	115
6.8.3. Neutralen-Reabschirmung im SOL	115
6.8.4. Prompte Redeposition von erodiertem Wolfram	116
6.8.5. Erosionsursachen	116
6.8.6. Testfälle verschiedener Randschichtparameter	117
6.8.7. Reduktion der Einschlussgüte im Niedrigdichtefall	117
6.8.8. System der externen Brennstoffzufuhr	117
7. Zusammenfassung	119
A. Ergänzungen zu den PWW-Studien	123
A.1. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Brennstoffionisation	123
A.2. Ionendichteprofil im SOL bei konvektivem Senkrechttransport	124
A.3. Reopazität des SOL für Pedestal-Neutrale	125
A.4. Anteil an keV-Pedestal-Neutralen	126
A.5. Schätzung der Transportkoeffizienten an der Separatrix	126
B. Ergänzungen zu den Codes CELLSOR und CELLSOR ERO	128
B.1. Numerischer Fehler der Rückrotationsmethode	128
B.2. Lösung der Kontinuitätsgleichung im SOL: Variation der Konstanten	129
B.2.1. Lösungen der homogenen Gleichung	129
B.2.2. Lösungen der inhomogenen Gleichung	130
B.3. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Thompson-Verteilung	132
B.4. Zuweisung von Zellnummern	132
B.5. Test der Verwerfungsmethode nach Cupini <i>et al.</i>	133
B.6. CELLSOR-Rechnung des Ablationsprofils bei Pelletinjektion	133
B.6.1. Quellprofil der Kontinuitätsgleichung	135
C. Sonstiges	136
C.1. Tritiumbedarf eines Kernfusionskraftwerks	136
C.2. Zeitliche Entwicklung des Fusionsprodukts	137
C.3. Erweiterungen des IPB98(y,2) Skalierungsgesetzes	137
C.3.1. Stark abstrahlende Kernplasmen	137
C.3.2. Dichte-Roll-Over und Einschlussverbesserung	138
C.3.3. Ungelöste Probleme der IPB98(y,2)-Skalierung	139
C.4. Zerstäubungskurve für $W^+ \rightarrow W$ nach Eckstein	140
Literaturverzeichnis	141

Tabellenverzeichnis

3.1. Wesentliche DEMO1- <i>Designparameter</i>	33
4.1. Ladungszustand Z_i sowie Verunreinigungskonzentration c_i im äußeren SOL.	56
5.1. Parameter der Benchmarkfälle.	71
5.2. Liniengemittelte Dichte \bar{n}_n im ITER- sowie DEMO-Testfall.	75
6.1. Randschichtparameter der untersuchten Testfälle.	86

Abbildungsverzeichnis

3.1. Schematische Darstellung der wandnahen Plasmabereiche.	13
3.2. Radialer Verlauf des Pedestaldrucks.	19
3.3. Werte des Pedestaldrucks innerhalb der <i>PDB3V2</i> -Datenbank.	20
3.4. Operationsraum für Tokamaks.	21
3.5. Skizze des Tokamak-Prinzips.	22
3.6. Tokamak-Koordinatensystem.	23
3.7. Darstellung der exakten Flussflächen.	24
3.8. Poloidaler Plasmaquerschnitt des Codes HELIOS.	25
3.9. Poloidalquerschnitt eines <i>Divertorplasmas</i>	25
3.10. Radialer Aufbau eines Tokamak-Reaktors (ARIES-I).	26
3.11. Zerstäubungsausbeute vs. Projektilenergie für $D \rightarrow W$	29
3.12. Einfallswinkel von Ne^{4+} beim Wandaufprall.	29
4.1. Darstellung der Nullstellen der <i>Begleiter-Matrix</i>	41
4.2. Skizze zur Veranschaulichung der Rückrotationswinkel.	43
4.3. Darstellung des flach ausgestreckten SOL.	66
5.1. Schema zur Verifikation und Validierung.	69
5.2. Atomdichte im <i>DEMO-Benchmarkfall</i>	73
5.3. Atomdichte im SOL des <i>DEMO-Benchmarkfalls</i>	73
5.4. Atomdichte im <i>ITER-Benchmarkfall</i>	74
5.5. Atomdichte im SOL des <i>ITER-Benchmarkfalls</i>	74
5.6. Winkelverteilung der Deuterium-Neutralen beim Wandaufprall.	77
5.7. Energieverteilung der Deuterium-Neutralen beim Wandaufprall.	77
6.1. Schematische Darstellung schädigender Teilchenspezies.	81
6.2. Gas-Pellet-Vergleich der atomaren Brennstoffdichte.	82
6.3. Schematische Darstellung der Teilchenflüsse in der Plasmarandschicht.	83
6.4. Histogramm der radialen Elektronentemperatur.	89
6.5. <i>Heliumkonzentration</i> im Kernplasma.	92
6.6. Radiales Ionendichteprofil der Testfälle.	93
6.7. <i>Mittlere freie Weglänge</i> eines Wasserstoff-Neutralteilchens für CX-Stöße.	94
6.8. Primäre, globale <i>Nettoerosionsrate</i> vs. Wandabstand.	96
6.9. <i>Neutralen-Reabschirmung</i> im SOL.	99
6.10. Durch <i>Pedestal-Neutrale</i> hervorgerufene Zerstäubungsausbeute.	100
6.11. Energieverteilung von auf die Wand prallenden D-T-Neutralen: NDF (diffusiv).	102
6.12. Energieverteilung von auf die Wand prallenden D-T-Neutralen: SF (konvektiv).	102
6.13. Ext. Brennstoffzufluss (Pellets) vs. Wandabstand.	103
6.14. <i>Prompter Redepositionsanteil</i> vs. Wandabstand.	104
6.15. Schadenskanäle nach relativen Anteilen im SF.	106
6.16. Schadenskanäle nach relativen Anteilen im NDF.	106
6.17. Anzahl ablatierter Pelletmoleküle vs. Wandabstand im NDF.	107
6.18. <i>IPB-Skalierung</i> : Pedestaltemperatur vs. <i>Shaping</i>	108
6.19. <i>Nettoerosionsrate</i> vs. <i>Wandabstand</i> des modifizierten NDF.	109
6.20. Histogramme der Ionendichtepprofile des NDF und des SF.	111
6.21. Wahrscheinlichkeitsverteilung <i>finaler CX-Stöße</i>	112

6.22. Lokale Zerstäubungswahrscheinlichkeiten.	113
A.1. Verteilung der Brennstoffionisation im NDF.	123
A.2. Ionendichteprofil im SOL bei konvektivem Senkrechttransport.	124
A.3. Reopazität des SOL für <i>Pedestal-Neutrale</i>	125
A.4. Anteil an <i>keV-Pedestal-Neutralen</i>	126
B.1. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der <i>Thompson-Verteilung</i>	132
B.2. Test der <i>Verwerfungsmethode</i> nach Cupini <i>et al.</i>	133
B.3. Radiales Ablationsprofil bei Pelletinjektion.	134
B.4. SOL-Quellprofil des Stellaratorfalls.	135
C.1. Entwicklung des Tripelprodukts über 5 Jahrzehnte.	137
C.2. Einschlussverbesserungsfaktor vs. <i>Greenwald-Zahl</i>	138
C.3. Zerstäubungskurve für $W^+ \rightarrow W$	140

Abkürzungsverzeichnis

Eigendefinitionen

CELLSOR Code to Estimate the Lifetime Limited by Sputtering Of a Reactor wall.....	9
CXn durch Ladungsaustauschstöße freigesetzte Atome	95
HDF Hochdichtefall.....	85
KDF kritische-Dichtefall	85
MBV Maxwell-Boltzmann-Verteilung.....	17
NDF Niedrigdichtefall	87
Ped.-Neutrale im Pedestal durch CX-Stöße freigesetzte Brennstoffatome.....	98
keV-Ped.-Neutrale Pedestal-Neutrale mit keV-Energien	93
Pel.-CXn Pedestal-Neutrale, freigesetzt durch CX-Stöße mit Atomen des Pellet-Fuellings	
Rec.-CXn Pedestal-Neutrale, freigesetzt durch CX-Stöße mit Atomen des Wandrecyclings..	91
SF Stellaratorfall.....	87
TT Testteilchen	10
ZA Zerstäubungsausbeute	28

Begriffe der Kernfusionsforschung

ARIES Advanced Reactor Innovation and Evaluation Study.....	26
DCLL Dual-Coolant Lithium Lead.....	27
DEMO Demonstrationskraftwerk	3
DEMO1 europäisches Konzept eines gepulsten DEMOs	
ECRH Electron Cyclotron Resonance Heating.....	21
EFDA-Roadmap EFDA-Roadmap zur Realisierung von Fusionsstrom	95
ELM Edge Localized Mode	17
FGM Functionally Graded Material	31
Fuelling externe Brennstoffzufuhr	5
HCLL Helium Cooled Lithium Led.....	27
H-Mode High-Confinement-Mode	17
HCPB Helium Cooled Pebble Bed	27
HFS Hochfeldseite	38
ICRH Ion Cyclotron Resonance Heating.....	21
ILW ITER-like wall	70
IPB ITER-Physics-Basis	18
KFF Kernfusionsforschung	7
KFT Kernfusionstechnologie	1
LOCA Loss of Coolant Accident	3
MMSG Multi-Maschinen-Skalierungsgesetz	18
NBI Neutralteilcheninjektion	21
NFS Niedrigfeldseite	24
PWW Plasma-Wand-Wechselwirkung	3
SOL Scrape-Off-Layer	4
SA Smart-Alloy	3
TBR Tritium-Brutrate.....	XII
WCLL Water Cooled Lithium Lead	27

Tokamaks

AUG Axialsymmetrisches Divertor-Experiment Upgrade	35
COMPASS COMPact ASSEmbley	87
EAST Experimental Advanced Superconducting Tokamak	70
ITER International Thermonuclear Experimental Reactor	3
JET Joint European Torus	5
JT-60 Japan Torus-60	87
MAST Mega-Ampere Spherical Tokamak	88
NSTX National Spherical Torus Experiment	88
TEXTOR Tokamak EXperiment for Technology Oriented Research	7
WEST Tungsten (W) Environment in Steady-state Tokamak	29

Einheiten

ÖE Öläquivalent	1
SKE Steinkohleeinheit	1
dpa Verrückungen pro Atom	6
fpy Vollbetriebsjahr	4

Chemische Elemente

D Deuterium	2
T Tritium	3
He Helium	2
Li Lithium	2
Be Beryllium	6
N Stickstoff	5
Cr Chrom	3
Kr Krypton	5
Y Yttrium	3
Xe Xenon	5
W Wolfram	3
Pb Blei	6
U Uran	2

Organisationen und Einrichtungen

BGR Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe	1
CANDU CANada Deuterium Uranium	12
CCFE Culham Centre for Fusion Energy	32
EFDA European Fusion Development Agreement	32
IEA International Energy Agency	1
IPCC Intergovernmental Panel on Climate Change	2
OECD Organisation for Economic Co-operation and Development	2
PPPT Power Plant Physics and Technology	32

Sonstige

EIT Economies in Transition	2
PEV Primärenergieverbrauch	1
RAR Reasonably Assured Resources	2

Codes und Modellierung

d dimensional	
DGL Differentialgleichung	63
FoM Figure of Merit	8
MC Monte-Carlo	4
MCNP Monte-Carlo N-Particle Transport Code	6
PIC Particle-in Cell	30
TV Thompson-Verteilung	58

Allgemeine Begriffe der Physik

CoM Centre of Mass	46
el. elektrisch	11
exp. experimentell	11
kin. kinetisch	
CX Ladungsaustausch	5
magn. magnetisch	
MHD Magnetohydrodynamik	16
n Neutron	12
phys. physikalisch	
Schicht Debye-Schicht	4
QCD Quantenchromodynamik	11
pdf Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	57
WW Wechselwirkung	

Kapitel 1.

Einleitung

Die Bedingungen für Leben auf der Erde, in der uns bekannten Form, hängen sehr stark mit der Seltenheit des Prozesses der Kernfusion von Wasserstoff in der Sonne zusammen.¹

Auch die Bodenschätze auf der Erde verdanken wir der ganz speziellen Historie der Nukleosynthese² innerhalb der Milchstraße, welche durch stellare Kernfusion (exotherm, bis $A = 60$), sowie Kernfusion nach Supernovae-Explosionen³ (endotherm, auch $A > 60$), mit zahlreichen Elementen angereichert wurde, welche bis zu den Transuranen (Kernladungszahl $Z > 92$) noch heute natürlich auf der Erde vorkommen.

Diese spezielle Geschichte der Entstehung sowie Lage der Erde im Universum verhalf der Menschheit zu Ressourcen, welche es erlaubten den zivilisatorischen und technologischen Fortschritt bis ins heutige digitale Zeitalter voranzutragen. Und eben jene Ressourcen könnten erlauben den *weltweit wachsenden Strombedarf der Menschheit*⁴ in einigen Jahrzehnten, unter anderem durch kommerziell verfügbare Kernfusionstechnologie (KFT) zu decken.

Eine derartige oder vergleichbar *saubere* Energiequelle wird mit Sicherheit benötigt.⁵ Das zeigt bereits ein Blick auf die *statische Reichweite*⁶ von fossilen Energieträgern. Allein bei Braun- und Steinkohle lag der Primärenergieverbrauch (PEV) im Jahr 2014 bei 3,9 Gt ÖE (165 EJ), während die Reserve auf 705 Gt Steinkohleeinheit (SKE) (2070 EJ) geschätzt wurde, i.e. eine statische Reichweite von ca. 125 Jahren; [19] die tatsächliche Reichweite dürfte deutlich geringer sein. Bei Erdgas und Erdöl liegt jene bei 58 bzw. 53 Jahren für konventionelle und nicht-konventionelle Reserven.

¹Damit es zur Fusion zweier Kerne kommt, müssen jene eine hinreichend starke zueinander gerichtete kinetische Relativenergie aufbringen, um das abstoßende Coulomb-Potential der elektromagnetischen Wechselwirkung zu überwinden bzw. quantenmechanisch zu durchtunneln. Die Wahrscheinlichkeit dafür wird durch den Gamow-Faktor P_g beschrieben. [48] Im Inneren der Sonne, in deren Kern eine Temperatur von 15,6 Mio. K sowie ein Druck von 247,7 Mrd. bar herrscht, gilt für die Kernfusion des Wasserstoffs $P_g \approx 10^{-10}$. Diese Seltenheit der Kernfusion ist die Ursache dafür, dass die Sonne bereits seit 4,57 Mrd. Jahren brennt, und dies noch für ca. weitere 5 Mrd. Jahre tun wird.

²Neben dem Vorkommen schwerer Elemente im kosmischen Staub der Galaxie wurden im Laufe der Entstehungsgeschichte der Erde, zusätzlich schwere Elemente durch Asteroideneinschläge und Supernovae-Explosionen auf die Erde gebracht. [21] Ort und Zeitpunkt erdnaheer Supernovae-Explosionen können von Geologen und Astronomen durch Rechenmodelle abgeschätzt werden, basierend auf Satellitendaten von Breitschwerdt *et al.* sowie Staubanaysen von Meeresedimenten durch Wallner *et al.* [18, 148] Auf diese Weise wurden im Umkreis von 300 Lichtjahren 16 Sterne gefunden, welche innerhalb von nur 100k Jahren explodierten und nachweisbare Mengen Eisen-60 in tiefe Sedimentschichten der irdischen Meere eintrugen.

³Helle und massereiche Sterne mit mehr als etwa acht Sonnenmassen können, nachdem der Brennstoff im Kern aufgebraucht wurde, durch Supernovae-Explosionen *ableben*, wodurch sehr günstige Bedingungen für Nukleosynthese schwerer Elemente geschaffen werden. Diese werden in Form kosmischen Staubs durch den Raum geschleudert und bis zu mehrere 100 Lichtjahre transportiert. [118]

⁴Die Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) veröffentlichte das *New Policy Scenario* der International Energy Agency (IEA) aus dem Jahr 2015; demnach steige der globale Energiebedarf bis zum Jahr 2040 um ca. 34 % an, i.e. von 14,05 (2014) auf 18,8 Gt Öläquivalent (ÖE). [19]

⁵Der Energiemarkt befindet sich im Wandel von zentraler hin zu dezentraler Stromerzeugung sowie zu autonomen Haushalten und Kommunen. Allerdings könnte zukünftig parallel dazu, alleine durch den standortbezogenen Strombedarf von Großkonzernen oder Geheimdiensten, eine zusätzliche industrielle Nachfrage nach Kernfusionskraftwerken mit Ausgangsleistungen von einigen 100 MW elektrisch entstehen. Das Rechenzentrum von Google benötigt bereits heute eine elektrische Leistung von bis zu 200 MW - Tendenz steigend.

⁶Reichweite der globalen Reserven bei aktuellem Verbrauch.

Auch die *ökonomisch förderbaren* Uranreserven könnten nach 38 Jahren erschöpft sein.⁷ Zusätzlich zur Reichweite lassen sich weitere limitierende Parameter hinzuziehen, wie etwa die geschätzten kumulativen Emissionen potenzieller Energiequellen an Treibhausgasen in CO₂-Äquivalenten. Die Klimavorhersagen des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) zeigen - trotz der hohen Unsicherheiten - eindeutig den Mechanismus der anthropogen herbeigeführten bzw. beschleunigten globalen Erderwärmung auf, welche nur durch den Wechsel auf emissionsschwächere Energiequellen zu verringern sein dürften. Selbst bei einer schwachen Reduktion der Emissionen der sog. *Annex-I*-Staaten⁸ bis zum Jahr 2100 würde eine globale Erderwärmung um 1, 1 – 2, 3 K - je nach Klimasensitivität⁹ ($1,5 \leq \Delta T_{2x} \leq 4,5$ K) - vorhergesagt (Abb. 8 im Bericht des IPCC).[65]

Dieser Aspekt soll an dieser Stelle nicht vertieft werden, aber er deutet an innerhalb welcher Kriterien sich eine potenzielle Energiequelle wie die irdische thermonukleare Kernfusion gegen weitere Technologien durchsetzen oder an deren Seite etablieren müsste. Wichtig sind dabei die Faktoren Ökonomie (Verfügbarkeit, Preis), Ökologie (kumulierte Emissionen, Rohstoffbedarf), Sicherheit (Unfallscenarien) sowie Kompatibilität (Netzbedarf).

Die KFT (Tokamaks, Stellaratoren) vereint Teilaspekte der drei Punkte Ökonomie, Ökologie sowie Sicherheit in vielversprechender Weise miteinander:

1. Sie ist Rohstoffarm betreibbar, denn sie setzt Kernbindungsenergie (MeV) frei, welche millionenfach größer ist, als chemische Bindungsenergie (eV), die bei Verbrennungsprozessen freigesetzt wird. Dadurch hat sie Reichweiten, die wir nach irdischen Maßstäben als *unendlich* betrachten.[16] Neutronen sorgen aufgrund ihrer Ladungsneutralität und der damit einhergehenden Resistenz gegen magnetische Kräfte für eine rasche Energieauskopplung aus dem Kernplasma, d.h. zu einem schnellen Energieübertrag auf die Wandkomponenten der Brennkammer. Die Stromerzeugung geschieht konventionell über ein Kühlmittel, welches die dabei entstehende Wärme von der ersten Wand aufnimmt und in einem Dampferzeugerkreislauf in Elektrizität überführt. Der *Verbrennungsprozess* kommt bei der Kernfusion, anders als bei Kohle-, Öl- oder Gasverbrennung, ohne primäre Emission von Treibhausgasen aus. Die primären Rohstoffe Deuterium (D)¹⁰ und Lithium (Li)¹¹ sind leicht förderbar und sicher in der Handhabung. Tritium, welches durch Brüten aus Li im Reaktor selbst erzeugt werden muss, ist zwar radioaktiv, wird aber bei Kernfusionsprozessen zu stabilem Helium (He) umgewandelt.¹²

⁷Reasonably Assured Resources (RAR), für Uran definiert als gewinnbar bis 80 USD pro kg Uran (U); errechnet aus Daten des Jahres 2014.[19]

⁸Als *Annex-I*-Staaten werden Industrienationen bezeichnet, die im Jahr 1992 Mitglieder der Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD) wurden, sowie Länder mit im Übergang befindlichen Wirtschaftssystemen, sog. Economies in Transition (EIT), darunter die russische Föderation, die baltischen Staaten, und diverse mittel- und osteuropäische Staaten. Für diese gilt das *NL-2%* Szenario, i.e. eine 2 prozentige Reduktion der jährlichen zusammengesetzten CO₂-Emissionen ab dem Jahr 2000.[65] Für die übrigen Staaten gilt das *IS92a*, i.e. ein Szenario ohne jährliche Begrenzung der CO₂-Emissionen.[65]

⁹Klimasensitivität ΔT_{2x} : Differenz ΔT der globalen Jahresmitteltemperatur der Erdoberfläche unter Verdoppelung der atmosphärischen CO₂-Konzentration.

¹⁰D kommt nach Craig auf der Erde im Anteil von etwa $1,58 \cdot 10^{-4}$ des gesamten Wasserstoffs vor.[25] Im Meerwasser (gemäß Gleich $\approx 1,34 \cdot 10^{21}$ l) sind $1,4 \cdot 10^{43}$ D-Atome enthalten.[52] Daraus ergibt sich eine rechnerische Reichweite für Kernfusion von ca. 30 Mrd. Jahren bei einem elektrischen Dauerleistungsbedarf von 1 kWh pro Mensch.

¹¹Enthalten im Gestein, nach Vikström *et al.* mit etwa 5 – 8 Mt sowie im Meerwasser nach Grosjean *et al.* bei einer mittleren Konzentration von $1,7 \cdot 10^{-7}$, ergo eine Reserve von < 30 Mt.[147, 55] Aus dem Gestein wurde von Fasel und Tran eine Reichweite für Kernfusion von 250-600 Jahren gefolgert sowie von Bradshaw *et al.* aus dem Meerwasser von mehr als 14 Mio. Jahren.[40, 16]

¹²Tritium hat eine Halbwertszeit von 12,3 Jahren (β^- -Zerfall).

Mit dem International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER) befindet sich aktuell ein gigantischer Tokamak in Cadarache (Frankreich) im Bau. Dieser soll im Jahr 2027 in Betrieb gehen. An ITER sollen diverse Brut-Blanket-Systeme zur Demonstration der Tritium (T)-Selbstversorgung erprobt werden. Weiterhin soll demonstriert werden, dass die Einschlussgüte der beim Verbrennungsprozess entstehenden He-Kerne, zur *Selbstheilung* des Plasmas ausreicht. In Tokamaks und Stellaratoren kommt es zur Aktivierung vorwiegend des Strukturmaterials, jedoch ohne Verursachung direkten radioaktiven Abfalls, i.e. ohne der Notwendigkeit einer Endlagerung. Die vorgesehene Höchstdauer einer Zwischenlagerung von Reaktorkomponenten beträgt nach Maisonnier *et al.* 100 Jahre.[99] Für den Betrieb eines Kernfusionsreaktors mit 2 GW Fusionsleistung im Plasma reichen gerade einmal 150-200 g T pro Betriebstag aus, wenn man von zusätzlichen Mengen in der Aufbereitungsanlage des Tritiumkreislaufs absieht.

2. Die Kernfusionstechnologie wird mit hohen Sicherheitsanforderungen weiterentwickelt, d.h. es wird an Lösungen geforscht, dass auch größte vorstellbare Unfallszenarien mit Kühlmittelverlust, sog. Loss of Coolant Accidents (LOCAs), unter Aufspaltung des Vakuumsgefäßes sowie der äußeren Gebäudestrukturen, ohne aktive Systeme, nicht zur Freisetzung *problematischer Mengen* an tritiiertem Wasser sowie Wolframtrioxid führen würden.¹³[99]
3. Für Investoren am Energiemarkt bleibt aufzuzeigen, dass Kernfusion mit einer zuverlässigen und ökonomisch betreibbaren Technologie zur irdischen Stromerzeugung nutzbar gemacht werden kann. In von Biel *et al.* durchgeführten Systemstudien zur Auslegung eines Demonstrationskraftwerks (DEMOS) auf der Basis von KFT, variierten die geschätzten Gesamtkosten für Strom aus Kernfusion, i.e. für Bau, Betrieb und Wartung, je nach Reaktordesign, zwischen 23 und 32 ct pro kWh elektrischer Ausgangsleistung; gerechnet auf 40 Jahre Betriebszeit.[10]

DEMO1 lautet der Arbeitstitel des europäischen Konzepts eines gepulsten DEMO, basierend auf dem Tokamak-Prinzip mit einem großen Maschinenradius von 9 m, einer elektrischen Ausgangsleistung von 500 MW und einer Plasmapulsdauer von 2 h.¹⁴[127, 42]

Die Frühdesignphase für DEMO1 läuft planmäßig bis zum Jahr 2021; eine Bauentscheidung soll im Jahr 2035 fallen; der erste Plasmabetrieb ist nach Romanelli *et al.* für das Jahr 2050 vorgesehen.[127]

Integrierte Kraftwerksstudien, welche im Parameterraum optimierte *Designpunkte* für spezielle Gewichtungen von Kriterien aus Technologie, Plasmaphysik sowie Ökonomie finden, werden mit sogenannten 0,5d *Systemcodes* durchgeführt. Das europäische *Baseline Design* basiert auf Studien mit dem PROCESS-Code.[83, 84, 43]

Aspekte der Plasma-Wand-Wechselwirkung (PWW) im Hauptraum der Brennkammer und damit der Lebensdauer der ersten Wand, sowie implizit deren Rückkopplung auf die Reaktorverfügbarkeit und Ökonomie, fehlen bisher in derartigen Studien.

Die etabliertesten Systemcodes sind PROCESS und SYCOMORE (Reux *et al.*) in Europa sowie HELIOS (Johner *et al.*) in den USA.[124, 72]

¹³Dies soll durch die gezielte Entwicklung von T-Permeationsbarrieren bzw. Smart-Alloy (SA)-Wandkomponenten (Yttrium (Y)-Chrom (Cr)-Wolfram (W)-Legierungen) verhindert werden.[80] Letztere bilden nach Wegener *et al.* bei Sauerstoffkontakt und Kühlmittelverlust selbstpassivierende Oxidschichten aus.[152].

¹⁴Ein weiteres, weniger gefördertes europäisches Konzept bezeichnet mit DEMO2 einen technologisch weiterentwickelten Reaktor, der entweder durch einen hohen *nicht-induktiven Stromtrieb*, dem sog. *Bootstrap-Strom* beim Tokamak, oder durch die andersartige und komplexere Spulenanordnung des Stellarators, im Dauerbetrieb, dem sog. *Steady-State*-Betrieb, Strom erzeugen soll; die physikalischen Grundlagen von *Advanced Tokamaks* fasste Taylor zusammen.[139]

Diese Codes berechnen die Strahlungsverluste im Kernplasma in 1-d, aufgeteilt nach Synchrotron-, Brems- sowie Linienstrahlung der Plasmaverunreinigungen.

Zudem existieren Abschätzungen der Neutronenlasten der Wandkomponenten im Hauptraum der Brennkammer. An die Leistungsabfuhr im Divertor wird entweder die Anforderung gestellt, dass das Verhältnis der über die Separatrix strömenden Leistung zum großen Maschinenradius höchstens 17MW pro m beträgt,[42] oder es wird die radiale Abfalllänge der Leistung im Scrape-Off-Layer (SOL)¹⁵ über ein Multi-Maschinen-Skalierungsgesetz von Eich *et al.* berechnet und somit die benetzte Oberfläche des Divertors abgeleitet;[39] für einen vorgegebenen Abstrahlungsanteil der Leistung wird daraus die Wärmeflussdichte, die auf die Targetplatten des Divertors strömt, berechnet und beschränkt. Auch für die Wärmelasten der ersten Wand existieren in PROCESS Gleichungen; dabei wird jedoch keine Modellierung der Plasmaverhältnisse innerhalb des SOL vorgenommen. Die Erosion im Hauptraum der Brennkammer durch aufprallende Ionen und Atome wird in keinem dieser Systemcodes modelliert oder durch vereinfachte Gleichungen berechnet.

Für eine detaillierte Modellierung der Prozesse in der Plasmarandschicht stehen grundsätzlich mehrere am Experiment validierte Codes zur Verfügung:

1. Zur Modellierung der Neutralgaskinetik in der Plasmarandschicht sowie der Zerstäubung von Wandkomponenten durch Neutralteilchen, wurde der 3-d Monte-Carlo (MC) Code EIRENE entwickelt.[120] Dieser stellt das Standardwerkzeug zur Modellierung des Divertors an ITER dar.
2. Für Modellierungen der Plasmadynamik in 2-d bzw. 2,5-d entwickelte Braams die Codes B2 bzw. B2.5.[13, 14, 15]
3. Für eine detaillierte Modellierung der Trajektorien von erodiertem Wandmaterial wurden die Codes ERO und ERO2.0 entwickelt.[109, 77, 2] Diese erlauben eine Abschätzung der Redeposition von erodierten Wandatomen, sowie der Selbstzerstäubung durch im SOL ionisierte und nach einer Beschleunigung im elektrischen Feld der Debye-Schicht (Schicht) auf die Wand zurückkehrende erodierte Oberflächenatome.

Für eine integrale Modellierung der Nettoerosion durch Atome und Ionen, welche durch eine Zusammenführung der bestehenden Randschichtcodes gewährleistet werden könnte, mangelt es zur Integration in die Systemmodellierung an Verfügbarkeit sowie Kompatibilität.

Jedoch wurden mit diesen Werkzeugen gezielte Studien zur Beantwortung komplexer Fragestellungen der PWW vorgenommen. Für ITER wurde von Behrisch *et al.* durch Studien der Wanderosion mit B2-EIRENE vorhergesagt, dass die Erosion durch in heißen Plasmazonen umgeladene, zurückkehrende Neutralteilchen ein ebenso wichtiger Mechanismus werden könnte, wie die Erosion durch auftreffende Ionen. Die Gesamterosion wurde auf etwa 5kg W pro Betriebsstag, sowie einer Tonne W pro Vollbetriebsjahr (fpy) geschätzt.[7]

Die verstärkte Wandschädigung durch Neutralteilchen an ITER ist logisch, denn die Evolution von Tokamaks führt zu immer größeren Reaktoren mit stärkerem äußeren Magnetfeld sowie getriebenem Plasmastrom, einem verbessertem Energie- und Teilcheneinschluss, sowie verlängerten Plasmapulsen. Lange Plasmapulse und hohe Güten des Energie- und Teilcheneinschlusses sind der Schlüssel zur optimierten Leistungsbilanz, i.e. ein möglichst kleines Verhältnis aus investierter Betriebsleistung zur erzeugten elektrischen Ausgangsleistung. Hohe Einschlussgüten führen jedoch dazu, dass der Teilchentransport aus dem Kernplasma in den SOL abgeschwächt wird.

¹⁵Der SOL bezeichnet den Bereich offener magnetischer Feldlinien, welcher den Raum zwischen der letzten geschlossenen magnetischen Flussfläche (Separatrix) und der ersten Wand der Brennkammer einnimmt.

Dadurch werden die Ionenflüsse, die schädigend auf die Wand prallen reduziert. In DEMO1-relevanten Fusionsplasmen werden folgende Ionenspezies erwartet: D und T (Brennstoff), He (Fusions-Asche), Stickstoff (N) / Krypton (Kr) / Xenon (Xe) (*Seeding Gas*) sowie W (erodiertes Wandmaterial). In aktuellen Tokamak-Experimenten werden Edelgase gezielt ins Divertorplasma eingebracht (*Impurity Seeding*), um die abgeführte Leistung von den sehr lokalisierten *strike points* an den Targetplatten, über die abregende Linienabstrahlung ins Volumen zu verteilen. Bernert *et al.* konnten mit N am Joint European Torus (JET) 90% der über die Separatrix strömenden Leistung im Divertor abstrahlen; am *Axialsymmetrisches Divertor-Experiment Upgrade* (AUG) wurde ein vergleichbarer Wert mit Kr erreicht.[9]

Gleichzeitig wird in der Plasmarandschicht eine große thermische Energie gespeichert. Die hohen Temperaturen im sog. Randschichtpedestal führen dazu, dass durch Ladungsaustausch (CX)-Stöße zwischen *heißen* Plasmaionen und typischerweise *kalten* Neutralteilchen, hochenergetische Neutralteilchen aus dem magnetisch eingeschlossenen Kernplasma herausfliegen und auf die erste Wand im Hauptraum der Brennkammer prallen. Aufgrund der kontinuierlich starken ext. Brennstoffzufuhr (Fuelling) ereignen sich an Tokamaks mit hoher Fusionsleistung, wie z.B. ITER mit 500 MW, solche CX-Stöße in heißen Plasmabereichen mit sehr hohen Stoßraten.

Für ein DEMO mit 2 GW Fusionsleistung kann daher erwartet werden, dass die Zerstäubung der ersten Wand vorwiegend, durch in heißen Plasmabereichen umgeladene Neutralteilchen, hervorgerufen wird; explizit für DEMO1 liegen jedoch keine veröffentlichten Studien auf diesem Gebiet vor. Tokar *et al.* veröffentlichten im Jahr 2017 Ergebnisse einer gezielten Modellierung der Zerstäubung an *Port Plugs*, i.e. den Öffnungen von Plasmadiagnostiken bzw. -aktuatoren in der Brennkammer, welche durch heiße Atome hervorgerufen wird.[141] Dabei wurde als wandseitige Neutralenquelle ausschließlich das *Wandrecycling*, jedoch nicht das *Fuelling* modelliert. Das Ziel dieser Arbeit stellt die Entwicklung eines Werkzeugs dar, welches die Abschätzung der stationären, globalen Nettoerosion im Hauptraum der Brennkammer eines Tokamaks erlaubt. Dabei steht insbesondere die Modellierung der Kinetik von Neutralteilchen sowie der durch diese verursachten Zerstäubung einer Wolframwand im Fokus. Die Modellierung soll ferner in zur Systemmodellierung kompatibler Weise erfolgen und an spezielle Erfordernisse der Modellierung von DEMO1 angepasst werden. Die Modellierung der wandseitigen Neutralenquelle soll sowohl das Wandrecycling als auch das externe Brennstoffzufuhr (Fuelling) beinhalten. Darüber hinaus sollte das entwickelte Werkzeug verifiziert werden.

Neben der Wärmelasten, sowie der Zerstäubung der obersten protektiven Wolframschicht der ersten Wand an DEMO1, kommt es aufgrund des Mechanismus' der Energieauskopplung aus einem D-T-Plasma, zur Schädigung des Strukturmaterials im Reaktor-*Blanket*.

Die Brennreaktion im Kernplasma, i.e.



führt zur Freisetzung von Neutronen mit einer kinetischen Energie von 14,1 MeV. Diese fliegen durch die erste Wand tief ins Reaktor-Blanket und werden durch inelastische Stoßkaskaden moderiert. Beim Durchdringen der vorderen 10 cm des Blankets werden etwa 90% *der kin. Energie*¹⁶ der Neutronen in Wärme umgewandelt.¹⁷

¹⁶Einige Monate vor der Aufnahme der Arbeiten an dieser Dissertation wurde mir die Aufgabe aufgetragen, ein vereinfachtes Modell des Tritiumkreislaufs sowie der Neutronenschädigung im Reaktor-Blanket zu entwerfen. Die Angabe bezieht sich auf die Ergebnisse dieser Modellierung, welche an ein Modell von Freidberg angelehnt war.[45]

¹⁷Der konventionelle Mechanismus der Energieauskopplung und Stromerzeugung besteht aus der Wärmeaufnahme des Kühlmittels sowie dem dadurch bedingten Antrieb der Generatorturbine zur elektrischen Stromwandlung.

Die moderierten Neutronen erzeugen anschließend hohe Reaktionsraten für die zur Selbstversorgung benötigte T-Brutreaktion mit dem in den Brutzonen befindlichen Li.

Aufgrund des parasitären Neutroneneinfangs beim Durchdringen der plasmaseitigen Wolframschicht, ist die Dicke dieser Schicht nach Bolt *et al.* auf höchstens 2 – 3 mm begrenzt.¹⁸[12]

Im *Strukturmateriale* kommt es zur Schädigung durch Stoßkaskaden zwischen Gitteratomen des Festkörpers und den eindringenden Neutronen.¹⁹ Die durch Verrückungen im Festkörpergitter induzierte *Versprödung* des Materials führt zwangsläufig zum Austausch der Komponente.

Für DEMO1 wurde die *Neutronenschädigung* im Blanket durch Rechnungen mit dem Monte-Carlo N-Particle Transport Code (MCNP) modelliert. Darauf basierend berichteten Romanelli *et al.* in der *EFDA-Roadmap zur Realisierung von Fusionsstrom* (EFDA-Roadmap), dass der Austausch des Start- bzw. Nachfolgeblankets an DEMO1 nach einer Schädigung von 20 bzw. 50 dpa vorgesehen wird.[127]

Ein weiteres Ziel dieser Arbeit umfasst das systematische Studium der Nettoerosion der ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer von DEMO1, zur Identifikation von *akzeptablen* Wertebereichen der Parameter der Plasmarandschicht; basierend auf dem aktuellen DEMO1-*Baseline Design*. Dazu soll, in Anbetracht der Neutronenschädigung des Blankets, ein Kriterium für *akzeptable* Nettoerosionsraten, welche durch PWW verursacht werden, erarbeitet werden.

¹⁸Weitere Neutronenverluste entstehen für das T-Brüten durch mit Diagnostik-Port Plugs bedeckte Oberflächenbereiche der Brennkammer. Zur Kompensation werden die Brutzonen gemäß Boccaccini *et al.*, bei den europäischen Blanket-Konzepten für ITER, mit Materialien wie Beryllium (Be) bzw. Blei (Pb) zur *Neutronenvervielfachung* angereichert.[11]

¹⁹Die Schädigung des Festkörpers wird in Verrückungen pro Atom (dpa) gemessen.

Kapitel 2.

Codes zur Randschichtmodellierung in Kernfusionsplasmen

Die Bedeutung von Neutralteilcheneffekten für die Plasmadynamik in der Randschicht von Kernfusionsplasmen war in der Kernfusionsforschung (KFF) bereits zum Ende der 1970er Jahre bekannt. Insbesondere die Rolle des Recyclings an aus der Wandebene herausragenden *Limitern*¹ sollte mithilfe von Neutralgas-Transportcodes modelliert werden.

Die erste Veröffentlichung eines Neutralgas MC-Codes, geht auf Hughes und Post und den Code AURORA im Jahr 1978 zurück.[66] In AURORA wurde der Tokamak als unendlicher Kreiszyylinder behandelt.² Die Plasmaparameter wurden als Funktionale der Radiuskoordinate vorgegeben. Der Code wurde zur Abschätzung der Wandreflexion, der Oberflächenzerstäubung sowie der radialen Neutralgasverteilung verwendet.

Aus AURORA ging unter anderem der 3-d kinetische MC-Code EIRENE von Reiter hervor, der seit den frühen 1990er Jahren eines der Standardwerkzeuge zur Modellierung von ITER³ darstellt.[122]

EIRENE ersetzte Anfang der 1980er Jahre geometrisch den unendlichen Zylinder durch eine poloidal gesehene kreissymmetrische Tokamak-Anordnung,⁴ welche durch eine Anordnung poloidaler Gitternetze in 2-d an verschiedenen toroidalen Positionen approximiert wurde.[120] Die Gitterfeinheit war variabel und insbesondere in der Umgebung des angrenzenden Limiters besonders fein. EIRENE wurde in der Planungsphase vom Tokamak EXperiment for Technology Oriented Research (TEXTOR) (damals *KFA Jülich*) zum Studium von Recyclingeffekten möglicher Limiter- bzw. Divertorkonfigurationen am TEXTOR entwickelt.

Im Jahr 1986 wurde mit B2 ein umfangreicher 2-d Multi-Fluid-Code im Rahmen der *Dissertation* sowie eines *NET-Reports* von Braams veröffentlicht, welcher es erlaubte die Plasmadynamik in der Randschicht von Tokamaks zu berechnen.[13, 14]

In B2 wurden die klassischen *Braaginskii-Gleichungen*[17] (Transportprozesse im Plasma) in 2-d gelöst. Der parallele Transport wurde klassisch (Braginskii) und der senkrechte Transport *anomal* beschrieben.⁵

Zur Berechnung des Transports von erodiertem Wandmaterial wurden die Codes ERO (1993) und dessen Weiterentwicklung ERO2.0 (2016) entwickelt.⁶ ERO wurde zunächst zur Abschätzung der Erosions- und Depositionsraten von limiterähnlichen Kohlenstoffproben, welche dem SOL-Plasma von JET-Entladungen ausgesetzt wurden, entwickelt. Aktuelle Studien beziehen sich typischerweise auf Be- sowie W-Divertor- sowie Wandkomponenten.

¹Mit *Limiter* wird eine materielle Barriere zur äußeren Begrenzung des Plasmas in der Brennkammer bezeichnet. Zur Teilchen- und Leistungsabfuhr wird an heutigen Tokamaks typischerweise eine *Divertor*-Konfiguration bevorzugt; für Details zur *Divertor*-Konfiguration siehe Kap. 3.3.4.

²Der reduzierten Rechenkapazität damaliger Computersysteme war geschuldet, dass - im Vergleich zu heutigen Codes - stark vereinfachende Annahmen getätigt wurden, etwa die eines monoenergetischen initialen Ionenflusses auf die erste Wand sowie monoenergetischer Neutralteilchen, i.e. mit Zuweisung der mittleren Energie eines Ions des lokalen Plasmahintergrunds nach CX-Stößen, anstelle des *Ziehens* aus einer Energieverteilung.

³*International Thermonuclear Experimental Reactor*; in Cardarache, Frankreich im Bau.[107]

⁴DEGAS (Princeton Plasma Physics Laboratory) und NIMBUS, für Vorabstudien zum JET, sind nahezu zeitgleich entwickelte *Ableger* von AURORA.[60, 28, 122]

⁵Kap. 3.2.7.

⁶Im Jahr 1993 wurde eine erste Beschreibung des Codes ERO von Naujoks *et al.* publiziert.[109] Kirschner *et al.* veröffentlichten eine detaillierte Beschreibung von ERO.[77]

ERO2.0 erweiterte ERO um eine verbesserte Beschreibung der Magnetfeld- sowie Oberflächentopologie der Komponenten mit Plasmakontakt.

Ab den späten 1980er Jahren kam es zur iterativen und nichtlinearen Kopplung von kinetischen Neutralgas- sowie Fluidodynamikcodes (z.B. B2-EIRENE / SOLPS).⁷ SOLPS wurde verwendet um den ITER-Divertor sowie die Anforderungen an das System der Brennstoffzu- und -abfuhr zu modellieren.⁸

In B2.5 (ab 1996) wurden sämtliche Gleichungen separat für Elektronen sowie sämtliche Ladungszustände der verschiedenen Ionen gelöst.¹⁰ Die Gleichungen umfassten die Kontinuitäts- sowie Impulsbilanzgleichungen diverser Ionenspezies, deren Kopplungsterme durch Ionisation, Rekombination und Reibung, eine Elektronen-, Ionen- und Neutralteilchentemperaturgleichung sowie eine Gleichung für das elektrische Potenzial.[15] Diese Codes erlauben es heute - in kombinierter Anwendung - zeitabhängige und lokale sowie komplexe Fragestellungen zu beantworten. Selbst auf heutigen Computersystemen können dazu gemäß Baelmans *et al.*, je nach Detailgrad und wissenschaftlicher Fragestellung, für einen Parametersatz einige Sekunden bishin zu vielen 100 Stunden an Rechenzeit nötig sein.[5] In der konkreten Planung eines Kernfusionsreaktors (Tokamak / Stellarator) bzw. -Experiments können dynamische Lösungen für sehr spezifische und lokale Fragestellungen gefunden werden.

2.1. Integrierte Systemmodellierung

Im Rahmen der *Frühdesignphase* des *europäischen Konzepts eines gepulsten Demonstrationskraftwerks* (DEMO1) werden mithilfe von 0,5-d Systemcodes physikalische, technologische und ökonomische Wechselwirkungen durch Skalierungsgesetze und vereinfachte Modelle sowie Parameterabhängigkeiten approximiert, sodass für eine spezielle Figure of Merit (FoM) innerhalb von Sekunden bis Minuten ein lokales Optimum (Design Punkt) innerhalb dieses Parameterraums gefunden werden kann.

Die Frage der Wandflüsse sowie -erosion im Hauptraum der Brennkammer ist mit den bestehenden Codes nicht ohne erheblichen Aufwand in die Systemmodellierung integrierbar. Dies würde eine aufwändige Ankopplung von nur bedingt kompatiblen Codes wie B2.5, EIRENE sowie ERO2.0 erfordern. Diese Codes müssten dazu in reduzierter Kapazität mit einem kongruenten Parametersatz, bei vereinheitlichter Geometrie, in einer übergeordneten Programmroutine initialisiert werden.

Um Aspekte der PWW in die Frühdesignphase der DEMO1-Modellierung sowie in globale Systemstudien einzubringen, wird vielmehr ein dediziertes, kompatibles und geschlossenes Werkzeug benötigt. Dieses sollte in der Lage sein eine vereinfachte Fragestellung unter Verwendung von wenigen Parametern zu beantworten.

Eine solche Fragestellung stellt eine Abschätzung der mittleren globalen, stationären Nettoerosion im Hauptraum der Brennkammer durch Neutralteilchen sowie Ionen dar.

Modellierungsparameter, kompatibel zu Systemcodes wie *PROCESS*[83], könnten diese sein:

- die Beschaffenheit und Stärke des Transports innerhalb des SOL, senkrecht zu magn. Feldlinien: D_{\perp} , v_{\perp} , parallel dazu: τ_{\parallel} ;

⁷Die Kopplung geschah zunächst mit erheblichen Schwierigkeiten im Konvergenzverhalten, insbesondere im Falle starken Wandrecyclings, welche in den 1990er Jahren gelöst werden konnten.[122]

⁸Bis zur Version SOLPS4.0 war nicht die neuere Version des Multifluidcodes B2.5, sondern die ursprüngliche Version B2 enthalten. Zu Beginn des Jahres 2015 wurde ein neues dediziertes Kombipaket, bestehend aus der umfangreichsten Version von EIRENE sowie des aktualisierten Fluidcodes B2.5[15] sowie eines verbesserten numerischen Kopplungsalgorithmus von Wiesen *et al.* als SOLPS-ITER eingeführt.⁹[157]

¹⁰Klingshirn *et al.* erzeugten eine verbesserte räumliche Diskretisierung und entwickelten einen passenden Lösungsalgorithmus.[78]

- der mittlere *Wandabstand* der Separatrix, Δ_{SOL} ;
- die Beschaffenheit des *Pedestals*: an der Spitze: Druck p_{ped} , Dichte n_{ped} und Temperatur T_{ped} ; an der Separatrix: Dichte n_{sep} und Temperatur T_{sep} ; sowie die Breite Δ_{ped} ;
- Parameter der *ext. Brennstoffzufuhr*: Frequenz und Geschwindigkeit injizierter, gefrorener Pellets: ν_{pel} und v_{pel} , sowie der wandseitig erforderliche Zufluss Γ_{ext} .

2.2. Entwicklung des CELLSOR-Codes

Mit dem Code to **E**stimate the **L**ifetime **L**imited by **S**puttering **O**f a **R**eactor wall (CELLSOR) wurde im Rahmen dieser Arbeit ein dediziertes Werkzeug zur Erweiterung der Systemmodellierung entwickelt.[6] CELLSOR ermöglicht es, vereinfachte, globale Fragestellungen der PWW in einheitlicher und prinzipiell zu Systemcodes kompatibler Weise zu beantworten.

Dabei wurden teilweise analoge Modellierungsansätze wie bei den Codes EIRENE, B2 und ERO verwendet und im Rahmen einer geschlossenen 1,5-d Behandlung zusammengeführt. Ferner wurden dedizierte Erweiterungen in den Code integriert, z.B. ein Pellet-Ablationsmodell zur Teilchenbilanzierung zwischen dem Kernplasma und dem SOL. Der Code wurde in den Sprachen *Python2.7* und *Cython* unter Verwendung der Pakete *Numerical Python* und *Scientific Python* geschrieben.

2.2.1. Schnittstellen zwischen CELLSOR und Systemcodes

Systemcodes lösen - in 0,5-d - ein gekoppeltes System nichtlinearer Gleichungen und selektieren teilweise noch ein globales Maximum an Hand einer vorgegebenen FoM. Fragen der PWW einzubeziehen, durch direkte Ankopplung von CELLSOR in diesen Optimierungsprozess, erscheint aus Rechenzeitgründen nicht sinnvoll;¹¹ dennoch bieten sich mehrere Möglichkeiten:

- für ein mit einem Systemcode gefundenen *Design Punkt* könnte, hinsichtlich der Erfüllung einer durch die globale Erosion vorgegebenen Randbedingung, abschließend bewertet werden für welchen Wandabstand dieser als gültig bzw. ungültig erklärt würde. Dazu könnten einige Parameter vom Systemcode an CELLSOR übergeben und jener in einer mehrstündigen Raster-Routine gestartet werden;
- aus den durch systematische Studien mit CELLSOR-Rechnungen gefundenen Ergebnissen könnten Skalierungsgesetze abgeleitet und in bestehende Systemcodes implementiert werden. Auf diese Weise könnten Systemcodes ohne Rechenzeiteinbußen, innerhalb der Optimierungsroutine, um eine Abschätzung der globalen mittleren Nettoerosion erweitert werden.¹²

¹¹Eine iterative CELLSOR-Rechnung, bei der - vergleichbar zu SOLPS - kinetische und Fluidgleichungen mit gegenseitigem *Feedback* gelöst werden, benötigen bei einer Zellauflösung im mm-Bereich mindestens mehrere Minuten.[6]

¹²Sollten im *Baseline*-Scenario für das Skalierungsgesetz vorausgesetzte Zahlenwerte des DEMO1-Referenzdesigns verändert werden, etwa für das Temperaturpedestal oder die Separatrixdichte, so könnte mithilfe von CELLSOR einmalig und zügig eine neue Skalierung gewonnen und in die Systemcode-Gleichungen eingebaut werden.

2.2.2. Entwicklungsschritte

Entwickelt wurde zunächst der 1-d MC-Code CELLSOR (Kap. 4). Dieser löst *1-d kinetische Gleichungen*¹³ im *7-d Phasenraum*¹⁴ innerhalb eines 3-d Torus, über den poloidal und toroidal gemittelt wird; Zellen entsprechen dabei den geometrischen Zwischenräumen der Flussflächen. Diese spezielle Anordnung erlaubt es zügig, in 1-d die mittleren Eindringtiefen für Atom- und Molekül-Plasma-WW'en sowie das resultierende Neutralgasprofil zu berechnen; die exakten räumlichen Winkel zur Oberflächennormalen beim Wandaufprall bleiben aufgrund der Isotropie von CX-Stößen erhalten; dies ist eine exklusive und notwendige Besonderheit des CELLSOR, denn die Zerstäubungskurven nach Eckstein zeigen starke Winkelabhängigkeiten für den Beschuss $D/T \rightarrow W$.

Weiterhin wurde eine analytische Lösung der Kontinuitätsgleichung in 1,5-d innerhalb des SOL formuliert, welche eine schnell konvergierende und voll kompatible Kopplung von kinetischer Beschreibung (CELLSOR) und Fluidbeschreibung erlaubt.¹⁵

Zur Abschätzung der Zersäubung durch Ionen wurde ein vereinfachtes analytisches 0-d Modell für die gefundenen konvergenten Lösungsflüsse entwickelt, welches die Beschleunigung innerhalb der Schicht anhand des Plasmatemperaturprofils approximiert.

Die Erweiterung CELLSOR ERO wurde schließlich entwickelt, um das Neutralgasprofil von erodiertem W sowie die Ionisationsverteilung, und dadurch den Anteil prompt redeponierender Wolframatomene, sowie den Anteil der Selbsterstäubung durch prompt zurückkehrende Wolframionen, abzuschätzen.

Weiterhin erlaubt das in CELLSOR integrierte Ablationsmodell entweder zwischen der Brennstoffzufuhr durch Gaseinlass oder durch Pelletinjektion zu unterscheiden.

Die zusätzliche Teilchenbilanzierung zwischen dem Kernplasma und dem SOL erlaubt ferner den benötigten Fluss der externen Zufuhrsysteme abzuschätzen.¹⁶

2.3. CELLSOR-Studien zur Analyse der Wanderosion an DEMO1

Die Kompatibilität zur Systemmodellierung ist eine wesentliche Anforderung an die Entwicklung des Codes CELLSOR. Darüber hinaus sollen mit CELLSOR und CELLSOR ERO systematische Studien durchführbar sein, welche erlauben Erkenntnisse, über die Prozesse sowie die Rolle der Parameter der Plasmarandschicht im Kontext der PWW im Hauptraum der Brennkammer von DEMO1, zu gewinnen.

Solche Studien stellen den Kern dieser Arbeit dar. Sie wurden mit einem typischen Parametersatz, welcher an das aktuelle *Baseline*-Design für DEMO1 angelehnt wurde, durchgeführt. Die aus der Auswertung der Ergebnisse dieser Studien gewonnenen Erkenntnisse ermöglichen eine Bewertung der Relevanz von Randschichtparametern für die PWW. Mithilfe dieser Studien soll erörtert werden, wie ein auf die PWW im Hauptraum der Brennkammer von DEMO1 optimiertes *Plasma-Scenario* aussehen könnte.

¹³Die Profile des Plasmahintergrunds und die Ratenkoeffizienten der WW'en der Testteilchen (TT) mit dem Plasmahintergrund, werden als Funktionen der Radiuskoordinate ρ vorgegeben (Ionisation, Dissoziation) bzw. berechnet (CX).

¹⁴Der 7-d Phasenraum wird aufgespannt aus 3-d kartesischen Impuls- (\vec{p}) und Ortsvektoren (\vec{r}) sowie dem TT-Zustand als Molekül- bzw. Atom, i.e. $D/T/D_2/T_2/DT$.

¹⁵Dabei wird jedoch - anders als bei B2 - nicht die Energiebilanzgleichung innerhalb des SOL gelöst.

¹⁶Insbesondere im Falle eines hochdichten SOL mit geringer Neutralen-Opazität, können - für große Wandabstände der Separatrix - Fälle auftreten, bei denen nur wenige 10% der am Gasventil startenden Brennstoffneutralen das Kernplasma erreichen, um dort nach Ionisationsstößen, als Brennstoffquelle zu wirken. Bei der Injektion gefrorener Pellets wurden dagegen in sämtlichen modellierten Testfällen mehr als 95% des Brennstoffs ins Kernplasma transportiert, ablatiert und anschließend ionisiert.

Kapitel 3.

Grundlagen

3.1. Kernfusion

Bei der Verschmelzung zweier leichter Kerne, i.e. zweier Kerne mit $Z < 26$, kann Kernbindungsenergie im Bereich mehrerer MeV freigesetzt werden.¹

Die Bedingungen für Kernfusion werden durch das konkurrierende Verhältnis zwischen der anziehenden starken Kraft² und der abstoßenden elektromagn. Kraft

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \quad (3.1)$$

bestimmt, welche schwächer werdend auf unendlich große Distanzen r zwischen zwei (Kern-)Ladungen q_1 und q_2 wirkt. Die starke Kraft wirkt dagegen extrem stark auf sehr kleinen Skalen zwischen direkt benachbarten Kernbausteinen. Die Kopplungsstärke der Quantenchromodynamik (QCD) wird durch

$$\alpha(Q^2) = \frac{12\pi}{(33 - 2N_f) \ln \frac{Q^2}{\Lambda^2}} \quad (3.2)$$

beschrieben, d.h. sie fällt mit dem Kehrwert des Quadrats des natürlichen Logarithmus eines experimentell (exp.) bestimmbar Skalenparameters Λ ab.[117]

Damit es zur Fusion zweier Kerne kommt, müssen jene zunächst das abstoßende *Coulomb-Potenzial*, welches aufgrund der Protonen beider Kerne besteht, überwinden; durch den quantenmechanischen Tunneleffekt kann dies bereits bei thermischen Energien geschehen. Die Tunnelwahrscheinlichkeit wird durch

$$W_T = \exp \left\{ - \frac{\pi q_1 q_2 e^2}{\epsilon_0 h \nu} \right\} \quad (3.3)$$

beschrieben, und wächst folglich mit der Relativenergie $E = h\nu$ zweier Stoßpartner an.

3.1.1. Deuterium-Tritium-Reaktion

Die Reaktionswahrscheinlichkeit lässt sich energieabhängig durch den Wirkungsquerschnitt $\sigma(E)$ angeben. Energien bzw. Temperaturen oberhalb von 20 keV³ lassen sich in einem thermischen System wie einem Plasma, aufgrund von Abstrahlungsprozessen und Transportverlusten, nur schwer erreichen. Bevorzugt sind also Reaktionen, die bei kleineren Energien einen Wirkungsquerschnitt im Bereich von einigen bn aufweisen und zudem Kernbindungsenergie von mehreren MeV freisetzen.

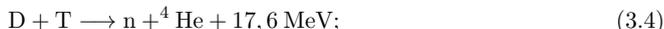
Zusätzlich sollte die Reaktion in einem thermischen System sowohl einen Mechanismus für den Energieeinschluss, als auch für die gezielte Energieauskopplung ermöglichen, also die freiwerdende Energie in elektrisch (el.) Energie umwandeln.

¹Ganz im Gegensatz zu chemischen Verbrennungsprozessen, bei denen die Bindungsenergien der Elektronen im Bereich von einigen eV liegen.

²Die starke WW ist bei 2,5 fm in etwa gleich stark wie die elektromagn. WW. Innerhalb ist sie deutlich stärker, wirkt bis 0,5 fm abstoßend und oberhalb davon anziehend.

³In der Plasmaphysik werden Temperaturen typischerweise in eV angegeben. Dabei gilt: 1 eV \equiv 11604 K.

Die vielversprechendste Reaktion ist dabei die Reaktion eines D- und eines T-Kerns, i.e.



die Energieauskopplung geschieht über das Neutron (n), welches 80% der freiwerdenden Energie trägt.⁴

Tritium-Brutreaktion

Der Massenbedarf an T für ein Kernfusionskraftwerk beträgt 56 kg T pro GW Fusionsleistung und pro fpy (Anh. C.1). Aufgrund der kurzen Halbwertszeit (12,3 Jahre) des radioaktiven T sowie dem geringen natürlichen Vorkommen (wenige kg) muss das benötigte T auf der Anlage selbstversorgend erbrütet werden.⁵

Brutreaktionen treten an beiden Li-Isotopen, dem selteneren ${}^6\text{Li}$ (7,5 %) und dem häufigeren ${}^7\text{Li}$ (92,5 %) auf, jedoch ist nur die Reaktion



exotherm und mit stark abgebremsten Neutronen möglich.

Das Brüten geschieht im sogenannten Reaktorblanket (Kap. 3.3.5); das ${}^6\text{Li}$ wird dazu bis auf 90 % angereichert.

Das Prinzip ist folgendermaßen: in der Brennkammer werden bei Fusionsreaktionen Neutronen mit kinetischen Energien von $E_{kin} = 14,1 \text{ MeV}$ freigesetzt. Die Neutronen treffen auf die erste Wand und werden dort durch Stöße mit Atomen des Festkörperrgitters moderiert.⁶

Einerseits soll auf diese Weise die konventionelle Stromerzeugung erfolgen, indem die im Blanket entstehende Wärme von einem Kühlmittel aufgenommen wird, welches dann eine Verdampfturbine betreiben soll; andererseits werden die nun moderierten Neutronen für die T-Brutreaktion (Gl. 3.5) verwendet.

3.2. Plasmaphysik

Ein Plasma bezeichnet ein hochionisiertes, *quasineutrales* Gas, für das gilt:

$$\frac{n_e - \sum_i Z_i n_i}{n_e} \ll 1. \quad (3.6)$$

Aufgrund des hohen Anteils an geladenen Teilchen lassen sich Plasmateilchen von magn. Feldern führen und einschließen.

⁴Die restliche Energie, die der He-Kern trägt, kann zur Heizung des thermischen Systems genutzt werden, falls die Teilcheneinschlusszeit im System die Zeit zur Thermalisierung durch Stoßprozesse überschreitet.

⁵Aktuell besteht zudem die Möglichkeit T, welches beim Moderationsprozess in schwerwassermoderierten Kernkraftwerken wie den CANada Deuterium Uranium (CANDU)-Reaktoren durch Neutroneneinfang gebildet wird, einzukaufen. Die Kosten lagen nach Willms im Jahr 2003 bei einigen 100k USD pro g T;[158] jährlich werden jedoch nur etwa 4 kg produziert.

⁶Mehr als 90 % der kin. Energie wird beim Durchdringen der ersten 10-15 cm des Wandkörpers an dessen Gitteratome abgegeben.

3.2.1. Debye-Länge

Elektrostatische Potentiale von Testladungen im Plasma werden außerhalb der sogenannten *Debye-Länge*, i.e.

$$\lambda_D = 7437 \frac{T_e [\text{eV}]}{n_e [\text{m}^{-3}]}, \quad (3.7)$$

durch das umgebende Plasma abgeschirmt; der Abfall des *Coulomb-Potenzials* wird - anders als im Vakuum - ab $r \geq \lambda_D$ verstärkt.

3.2.2. Formierung der Debye-Schicht

Als Schicht wird eine elektrostatische Raumladungszone bezeichnet, welche eine Übergangszone zwischen einem Plasma und einer leitenden Wand ausbildet.

Bei der Formierung der Schicht nimmt diese eine positive Nettoraumladung an, während die mit Plasma *benetzte* Wand eine negative Oberflächenladung annimmt.

Ursache dafür ist die niedrigere Masse und erhöhte Mobilität der Elektronen gegenüber den Ionen, welche zu einem früheren Erreichen und einer negativen Aufladung der leitenden Wand führt; dies geschieht unmittelbar ($\approx \mu\text{s}$) nach der Formierung eines ionisierten Plasmas. Die daraus resultierende el. Potentialdifferenz wirkt in der Folge für die Elektronen abbremsend sowie für die Ionen beschleunigend und stellt sich derart ein (stationäre Verhältnisse), dass die Ionen- und Elektronenflüsse zur Wand betragsgleich werden. Dies geschieht beim sog. *Floating-Potenzial* der Wand, i.e. $V_{\text{wall}} = -3k_B T_e / e$, welches relativ zum Plasmapotenzial besteht. Das *Floating-Potenzial* wird wiederum durch die Schicht vom angrenzenden Plasma abgeschirmt, d.h. das quasineutrale Plasma wird durch die positive Raumladung innerhalb der Schicht vom Wandpotenzial annähernd abgeschirmt.

3.2.3. Magnetische Vorsicht

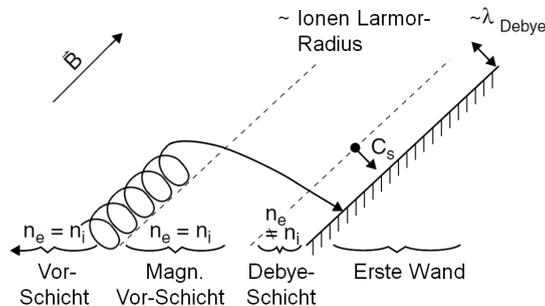


Abbildung 3.1.: Schematische Darstellung der wandnahen Plasmabereiche *Vorsicht*, *magn. Vorsicht* sowie *Debye-Schicht* mit quasiparallel zur Wand verlaufenden Feldlinien; bearbeitete Grafik aus dem Buch von Stangeby.[133]

Die Abschirmung des negativen el. Wandpotenzials vom quasineutralen Plasma ist außerhalb der Schicht nicht exakt Null, da es sich ja lediglich um ein deutlich steiler abfallendes *Coulomb-Potenzial* handelt, im Vergleich zur Ladung im Vakuum.

Dies bedeutet, dass es eine Zone außerhalb der Schicht gibt, die *magn. Vorsicht*⁷ (engl.: *magnetic presheath*), deren negatives el. Feld, i.e.

$$E \approx \frac{k_B T_e}{2eL}, \quad (3.8)$$

mit wachsendem Wandabstand L abnimmt und innerhalb der *Vorsicht* zu einer zur Wand gerichteten Beschleunigung der Ionen führt (Abb. 3.1).

3.2.4. Bohm-Kriterium

Das *Bohm-Kriterium* besagt, dass sich einerseits zwischen einem Plasma und einer leitenden Wand eine Schicht mitsamt *Vorsicht* formiert, und dass andererseits geladene Teilchen, welche die *Vorsicht* erreichen, auf die lokale Ionenschallgeschw., i.e.

$$c_s \approx \sqrt{\frac{k_B (\gamma_i T_i + T_e)}{m_i}}, \quad (3.9)$$

beschleunigt wurden; mit γ_i : polytroper Koeffizient (gleich dem Adiabatenkoeffizient; Näherung für kalte Ionen).[86] Die Ursache dafür ist der Druckgradient des Plasmas zwischen Quelle (Zentrum) und Senke (leitende Wand), welcher das Plasma zur Wand *fließen* lässt.

3.2.5. Mach-Zahl

Das Erreichen der Schallgeschw. wird mit *Mach-1* bezeichnet.⁸ Im Falle der Ionen beträgt die lokale Schallgeschw. in *paralleler Richtung*, i.e. entlang der magnetischen Feldlinien bzw. entlang der z -Koordinate,

$$c_s(z) \approx M(z) \sqrt{\frac{k_B (\gamma(z) T_i + T_e)}{m_i}}, \quad (3.10)$$

beschrieben durch die Mach-Zahl $0 \leq M(z) \leq 1$.⁹

In vereinfachten 0,5-d Modellierungen des parallelen Plasmatransports wird eine effektive Mach-Zahl als ein Maß der mittleren Ionenschallgeschwindigkeiten entlang der z -Koordinate verwendet.

⁷Die *magn. Vorsicht*, ferner mit *Vorsicht* bezeichnet, erstreckt sich über die Breite einiger *Larmor-Radien*.

Bei einer Temperatur von 10 eV sowie einer Dichte von $3,5 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$ und einer magn. Flussdichte von 6 **Tes!** beträgt das Verhältnis von *Larmor-Radius* ρ_{DT} zu *Debye-Länge* λ_D etwa $\rho_{DT}/\lambda_D \approx 100$.

⁸Im Jahr 1949 etablierte Bohm im Rahmen der kompressiblen Fluidtheorie, dass Ionen, aufgrund der Kraftfelder im Plasma, beim Erreichen der Grenzfläche zwischen Plasma und Debye-Schicht, auf die Ionenschallgeschw. $c_s \propto \sqrt{k_B T/m}$ beschleunigt sein müssen. Stangeby und Allen postulierten für kalte-Ionen Plasmen, dass diese Regel ferner unabhängig der Geschwindigkeit in tangentialer Richtung, i.e. entlang der Plasma-Debyeschicht-Grenzfläche der Fall sein müsse, i.e. dass jene einer geschlossenen *Mach-1-Fläche* entspräche.[135] In neueren Arbeiten konnte das Bohm-Kriterium für warme-Ionen Plasmen auch mit kinetischen Modellen gelöst werden; von Riemann unter Verwendung eines globalen polytropen Koeffizienten γ_i bzw. von Kuhn *et al.* sowie Jelic und Kos unter Verwendung einer lokalen Funktion von γ_i :[125, 126, 86, 71] Jelic und Kos zeigten, dass die Werte für *Fusionsplasmen* stets gegen $\gamma_i \rightarrow 1,5$ konvergieren.[71] Unter Verwendung dieses polytropen Koeffizienten γ_i gelang es Kos *et al.* das kinetische- und das Fluidmodell zu einem vereinten Bohm-Kriterium zusammenzuführen.[81]

⁹Die *Targetplatten* des Divertors befinden sich bei $z = L_{\parallel}$, mit $L_{\parallel} \approx 2\pi R_0$. Das bedeutet, dass eine Annahme über das Profil der Machzahl $M(z)$ sowie der Elektronen- und Ionentemperatur, am Rande der *Vorsicht* der Divertor-Targetplatten, zur Abschätzung der Ionenschallgeschw. in paralleler Richtung benötigt wird. Die lokale Temperatur im Divertor, welche phys. den benötigten Übergang zum *Divertor-Detachment* herbeiführt, liegt typischerweise im Bereich von $T_e, T_i \approx 1 - 2 \text{ eV}$.[133]

3.2.6. Stoßprozesse

Die Wahrscheinlichkeit für Stoßprozesse zweier Teilchen, wird über den Wirkungsquerschnitt σ angegeben.¹⁰ Dieser beschreibt die effektive Zielfläche in bn (10^{-28} m^2), die das Targetteilchen dem Projektilteilchen für Streuprozesse bietet.

Das Produkt aus Wirkungsquerschnitt σ und mittlerer relativer Teilchengeschw. v_{rel} wird als Reaktionsrate $\langle \sigma v_{rel} \rangle$ bezeichnet; diese trägt die Einheit $\text{m}^3 \text{ pro s}$.¹¹

Mittlere freie Weglänge

In Vielteilchensystemen kann die *mittlere freie Wegstrecke* λ_{mfp} in der Fluidbeschreibung für ein TT der relativen Projektilgeschw. v_{rel} , über die Dichte n möglicher Stoßpartner sowie den Reaktionsratenkoeffizienten $\langle \sigma v_{rel} \rangle$, angegeben werden.

Bezeichnet wird damit diejenige Wegstrecke x , die ein Teilchen einer Spezies i sowie des Flusses Γ_0 vor einem Stoßprozess, in einem Medium mit Stoßpartnern der Spezies j , durchschnittlich im Plasma zurücklegen würde, bis der $(1 - e^{-1})$ -fache Teil des Ursprungsflusses Γ_0 einen Stoß begangen hätte:[45]

$$\lambda_{mfp} = \frac{v_{rel}}{n \langle \sigma v_{rel} \rangle}; \quad \Gamma(x) = \Gamma_0 e^{\left(-\frac{x}{\lambda_{mfp}}\right)}. \quad (3.11)$$

Ladungsaustausch

Ein für die PWW relevanter Stoßprozess ist der *Ladungsaustauschstoß* (CX-Stoß) zwischen Neutralteilchen und Ionen, i.e.



bei dem ein Elektron vom Neutralteilchen X_1^0 an ein Ion X_2^+ abgegeben wird, sodass es für beide Stoßpartner zum Zustandswechsel zwischen elektrisch neutral und geladen kommt.¹²

Ionisation

Neutralteilchen X^0 können durch *Elektronenstoßionisation*, i.e.



in den Ionenhintergrund des Plasmas übergehen.

Bei diesem Stoßprozess wird einem im Atom gebundenen Elektron genügend Energie übertragen, um in einen ungebundenen Zustand überzugehen.¹³

¹⁰Im Buch von Freidberg werden die Grundlagen von Stoßprozessen ausführlich behandelt.[45]

¹¹Die Multiplikation der Dichte n möglicher Stoßpartner mit der Reaktionsrate $\langle \sigma v_{rel} \rangle$ gibt die Reaktionsfrequenz an.

¹²Durch CX-Stöße zwischen kalten Neutralteilchen und heißen Ionen können auf diese Weise hochenergetische Neutralteilchen entstehen, welche sich nicht magnetisch führen lassen und dadurch zu einer Gefahr für plasmatische Wandkomponenten werden können. Entgegen dazu wird dem Ionenhintergrund des Kernplasmas bei der Plasmaheizung, i.e. der Injektion eines hochenergetischen Neutralteilchenstrahls, durch CX-Stöße Energie zugeführt.

¹³Der Prozess der *Protonenstoßionisation* wird typischerweise erst bei Relativenergien im Bereich hunderter keV relevant. Selbst im Zentrum heißer Tokamak-Plasmen, herrschen typischerweise Temperaturen von weniger als 30 keV.

Neutralen-Abschirmung des SOL

Im Ergebniskapitel dieser Arbeit wird zur Bewertung der Güte eines Plasma-Scenarios hinsichtlich der PWW, die Fähigkeit des SOL,

1. kalte Neutralteilchen, welche durch das Wandrecycling ins Plasma gelangen, vom Eindringen in heiße Plasmabereiche innerhalb der Separatrix abzuschirmen,
2. heiße Neutralteilchen, welche in heißen Plasmazonen wie dem Randschichtpedestal durch CX-Stöße freigesetzt werden, von der Wand abzuschirmen,

gesprochen.¹⁴

Dabei wird in Ersterem Fall von Neutralen-Abschirmung Scr_{rec} und in zweiterem Fall von Neutralen-Reabschirmung Scr_b gesprochen.

Mathematisch lässt sich die Abschirmung Scr über die Breite des Wandabstandes der Separatrix sowie die mittleren freien Weglängen für Ionisations- und CX-Stöße formulieren, i.e.

$$Scr = \Delta_{SOL} \cdot \left(\frac{\lambda_{mfp,iz} + \lambda_{mfp,CX}}{\lambda_{mfp,iz} \cdot \lambda_{mfp,CX}} \right). \quad (3.14)$$

Diese Formulierung, insbesondere die der Reabschirmung Scr_b wurde spezifisch zur verbesserten Auswertung der globalen Erosionsstudien im Zuge dieser Arbeit eingeführt.

Im Falle $Scr \geq 1$ wird im positiven Sinne von einer *Abschirmung* gesprochen; je stärker $Scr \gg 1$, desto besser die Abschirmung. Die relative Opazität an unabgeschirmten Neutralteilchen, d.h. der Anteil des Startflusses, der den SOL ohne Stoßprozesse (Ionisation, CX) passiert, wird durch

$$op = \exp(-Scr) \quad (3.15)$$

ermittelt. Die Durchlässigkeit von aus dem Pedestal in Richtung Wand zurückkehrende Neutralteilchen, wird analog mit Reopazität op_b (des SOL) bezeichnet.

3.2.7. Transport

Die Bewegung von Plasmateilchen wird entweder kinetisch im 7-d Phasenraum anhand von Verteilungsfunktionen $f(\vec{p}, \vec{v}, t)$ (Geschw. \vec{v} , Ort \vec{p} , Zeit t),¹⁵ oder kollektiv als Fluid im 4-d Raum über die Dichte $n(\vec{p}, t)$, die Fluidgeschw. $v(\vec{p}, t)$ und den Druck $p(\vec{p}, t)$ beschrieben.

In der Magnetohydrodynamik (MHD) wird das Plasma zudem als Einzelfluid beschrieben, i.e. ohne Unterscheidung zwischen Elektronen und Ionen. Der stoßbehaftete klassische Transport geschieht durch Diffusion entgegen des Dichtegradienten.¹⁶

Die toroidale Geometrie von Tokamaks führt jedoch zu zusätzlichen *Teilchendriften* und Spiegeleffekten. Werden diese berücksichtigt wird vom *neoklassischen Transport* gesprochen.

¹⁴In der *Kernfusionsforschung* wird typischerweise bei Verunreinigungen von *Abschirmung* (engl.: *screening*) gesprochen; dabei wird das Kernplasma gegen das Eindringen von Verunreinigungen abgeschirmt. Dies ist von Bedeutung, da Verunreinigungen, insbesondere mit hoher Kernladungszahl Z , das Kernplasma bereits bei geringen Konzentrationen durch *Linienabstrahlung* abkühlen ($\propto Z^4$). Dies kann zu sogenannten *Disruptionen* führen. Weiterhin wird bei Neutralteilchen typischerweise bei der Brennstoffzufuhr von *Opazität* (engl.: *opacity*) gesprochen. Dies bezeichnet die Intransparenz des Plasmas gegenüber Neutralen, i.e. die Wahrscheinlichkeit mit der Neutralteilchen am Vordringen ins Kernplasma gehindert werden. Der Begriff der *Neutralen-Abschirmung* wurde nach Abstimmung mit Kollegen der Randschichtmodellierung, wie in Gl. 3.15 dargestellt, für die Auswertung dieser Arbeit eingeführt.

¹⁵In gyrogemittelten Näherungen lässt sich die Dimension des Phasenraums um 1 reduzieren.

¹⁶Dieser liegt nach Stroth typischerweise bei $D_{\parallel} \approx 10^7 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ bzw. $D_{\perp} \approx 10^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ entlang bzw. senkrecht zu den magn. Feldlinien.[136]

In der Plasmarandschicht kommt es im High-Confinement-Mode (H-Mode)-Betrieb zudem verstärkt zu *anomalem Transport* senkrecht zu den magnetischen Feldlinien; dessen Ursprung wird im Zusammenhang mit starken Turbulenzen und deren Einfluss auf die Magnetfeldstruktur erklärt. Im äußersten Plasma und dem SOL führen Turbulenzen sowie der zyklische Einbruch des Pedestals zu periodischen Plasmaauswürfen, den *Blobs* und den Edge Localized Modes (ELMs).¹⁷ Der *intermittente Transport* der *Blobs* ist konvektiver Natur.¹⁸[79, 22, 106]

Maxwell-Boltzmann-Verteilung

Entlang einer magnetischen Flussfläche verhält sich ein Plasma - in erster Näherung - wie ein heißes Gas der Temperatur T ; sofern Teilchen-Driftbewegungen sowie -Transportprozesse schwach genug zum Erreichen eines thermischen Gleichgewichtszustands sind. Die Plasmateilchen übertragen untereinander durch Stöße Impuls und Energie. Im thermischen System wird - abgesehen von Abstrahlungsverlusten, die Energie vorwiegend durch Kleinwinkelstöße zwischen schnellen und langsamen Teilchen umverteilt.¹⁹ Im thermischen Gleichgewicht folgen die Teilchengeschwindigkeiten einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung (MBV), deren Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, i.e.

$$f(v) = \left(\frac{2\pi T}{m}\right)^{-3/2} \exp\left\{-\frac{mv^2}{2T}\right\}, \quad (3.16)$$

die Wahrscheinlichkeit angibt ein Teilchen der Masse m , im Plasma der Temperatur T , mit der Geschwindigkeit v anzutreffen.

Larmor Orbits

Ionen und Elektronen werden durch die Lorentzkraft, welche geladene Teilchen in der Anwesenheit magnetischer Felder spüren, auf Kreisbahnen senkrecht zu ihrer Bewegung entlang magnetischer Feldlinien gezwungen. Die resultierende Gyrationbewegung erfolgt entsprechend der Teilchenmasse mit einer charakteristischen Gyrationfrequenz, i.e. gemäß Wesson:

$$\omega_{cj} = \frac{e_j B}{m_j}, \quad (3.17)$$

sowie einem charakteristischen Larmorradius, i.e.

$$\rho_j = \frac{v_{\perp}}{\omega_{cj}} = \frac{m_j v_{\perp}}{e_j B}, \quad (3.18)$$

der beschriebenen Kreisbahn.[156]

Driften

Die zuvor beschriebene Gyrationbewegung geschieht für geladene Plasmateilchen um das Führungszentrum der Bewegung, welches durch Driften verschoben werden kann.

¹⁷Die mit der *H-Mode* assoziierte Transportbarriere in der Randschicht, das *Pedestal*, zerberstet periodisch wie eine relaxierende Oszillation. Diese Instabilität von Moden der Plasmarandschicht (ELMs) führt zum zyklischen Einbruch und Wiederaufbau des verbesserten Energieeinschlusses sowie zu intermittenten Wärmepulsen in Richtung Divertor und zur ersten Wand.[24, 93, 97]

¹⁸In vereinfachten Modellierungen wird dieser durch die effektive Transportgeschw. senkrecht zu den magnetischen Feldlinien (v_{\perp}) angegeben.

¹⁹In Tokamak-Plasmen kommt es zu Verlusten durch *Synchrotronstrahlung*, gemäß Albajar *et al.*: $P_{synch} \propto \bar{n}_{20}^{0,38} T_{e0}^{2,1}$, und durch *Bremsstrahlung* sowie *Linienstrahlung* der Plasmaverunreinigungen, i.e. nach Johner: $P_{brems} \propto Z_{eff}(n_e)^2 \langle T_e \rangle^{0,5}$ sowie $P_{linie} \propto c_i n_e^2$. [3, 72]

Driften treten durch die Anwesenheit zeitlich veränderlicher oder senkrecht zu magnetischen Feldlinien verlaufender elektrischer Felder auf ($E \times B$ Drift), sowie auf Grund der Krümmung der magnetischen Bahnen (Krümmungsdrift) oder auf Grund des radialen Magnetfeldgradienten (∇B Drift).²⁰

Diffusion

Aufgrund von vorwiegend Kleinwinkelstößen sowie den vom Plasmazentrum auswärts gerichteten Driften kommt es netto zu einem typischerweise auswärts gerichteten Teilchentransport senkrecht zu den magn. Feldlinien.²¹ Dieser Transport ist in klassischer sowie neoklassischer Näherung diffusiver Natur, allerdings im Zusammenspiel mit Turbulenzen stark *anomal*,²² so dass typischerweise zur Modellierung effektive Diffusionskonstanten $D_{\perp,eff}$ verwendet werden, welche stark vom neoklassischen Fall abweichen.

3.2.8. Betriebsmodi und -grenzen in Tokamak-Plasmen

Die Betriebsmodi und -grenzen von Tokamaks basieren auf plasmaphysikalischen Prozessen, die im spezifischen Zusammenhang mit der Tokamak-Anordnung stehen. Für einen kommerziellen DEMO1-Tokamak sind der Betriebsmodus der *H-Mode* sowie Stabilitätsgrenzen wie das *Greenwald-Dichtelimit* des Randkernplasmas von Bedeutung.

H-Moden Einschluss

Werden magnetisch eingeschlossene Plasmen stark erhitzt, i.e. über einen empirischen Schwellwert der Heizleistung, dann kommt es typischerweise zu einem Übergang von schwachem Energieeinschluss (L-Mode) zu starkem Energieeinschluss (H-Mode).²³ Im Regime der H-Mode wurden nach Keilhacker - im Vergleich zur L-Mode - mehr als doppelt so große Energieeinschlusszeiten (Gl. 3.19) beobachtet.[75] Die zugrunde liegende Bifurkation des Plasmatransports in der Randschicht wird durch nichtlineare Turbulenzen getrieben.[33]

Multi-Maschinen-Skalierungsgesetz für den H-Moden Einschluss

Das am weitesten verbreitete Multi-Maschinen-Skalierungsgesetz (MMSG), ausgedrückt in Ingenieursparametern, basierend auf H-Moden Plasmen mit ELMs, ist die *IPB98(y,2)-Skalierung*, i.e.

$$\tau_{E_{IPB98(y,2)}} = 0.1445 H_H I_M^{0.93} R_0^{1.39} a^{0.58} \kappa_x^{0.78} n_{20}^{0.41} B_0^{0.15} M_{eff}^{0.19} P_L^{-0.69}. \quad (3.19)$$

²⁰Details zu den Driften können im Buch von Stangeby gefunden werden.[133]

²¹In der kinetischen Theorie wird die Änderung der Verteilungsfunktion nach Rosenbluth *et al.* durch Kleinwinkelstöße über die *Fokker-Planck-Gleichung* beschrieben.[128] Im Fluidansatz wird der Transport über die *Braginskii-Gleichungen* beschrieben.[17]

²²Der *anomale* Transport wurde bereits zu Beginn der 1990er Jahre beobachtet. Eine frühe Theorie zum Ursprung der Transportbarriere wurde von Itoh *et al.* publiziert.[69] Eine ausführliche Zusammenfassung über Turbulenzen und *anomalen* Transport kann in der ITER-Physics-Basis (IPB) aus dem Jahr 2007 gefunden werden.[33] Mikro- und Makro-Instabilitäten, die durch Inhomogenitäten der Dichte (*Zonal Flows*), der Temperatur (ITG: *Ion Temperature Gradient*) sowie des Magnetfeldes (TEM: *Trapped Electron Mode*) auf verschiedenen Skalen entstehen, führen zu Drift-Wellen und Turbulenzen.

²³Die benötigte Heizleistung zum Übergang von der L- zur H-Mode wurde von Martin *et al.* anhand von Daten der *ITPA CDBM Datenbank* im Hinblick auf das Design von ITER untersucht. Dabei wurde eine empirische Relation der erforderlichen Heizleistung P_{LH} zum Übergang in die H-Mode abgeleitet: $P_{LH} \approx 2,15 \cdot e^{0,107} \bar{n}_{20}^{0,782} B_T^{0,772} a^{0,975} R^{0,999}$. [100]

Symbole in Gl. 3.19: H_H : H-Faktor (Faktor der Einschlussgüte einer H-Mode gegenüber einer Standard-L-Mode), I_M : Plasma Strom in MA, R_0 / a : großer / kleiner Radius in m, κ_x : Vertikale Elongation des Plasmas an der X-Punkt Flussflächenkoordinate, n_{20} : liniengemittelte Dichte in 10^{20} m^{-3} , B_0 : toroidales magnetisches Feld auf der Plasmaachse in T, M_{eff} : effektive Massenzahl der Ionen sowie P_L : Verlustleistung in MW.^{[24][67, 33]}

Randschichtpedestal

Die Transportbarriere der Randschicht führt zu einem periodischen Auf- und Abbau eines *Randschichtpedestals* sowie zum verbesserten Energieeinschluss der H-Mode. Das Pedestal trägt erheblich zum eingeschlossenen Energieinhalt des Kernplasmas bei.²⁵

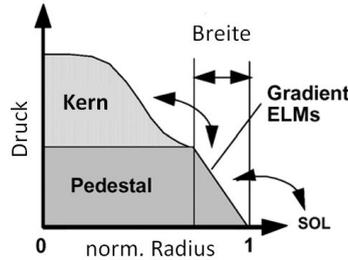


Abbildung 3.2.: Schematisches radiales Profil des Pedestaldrucks; bearbeitete Abb. aus der IPB.[33]

Abb. 3.2 zeigt schematisch das radiale Profil des Plasma- und Pedestaldrucks. Der radiale Temperaturgradient im Pedestal beträgt nach Wenninger *et al.* an DEMO1 minus einige 100 eV pro cm; dies entspricht einem Anstieg der Plasmatemperatur von der Separatrix bis zur Pedestalspitze um mehrere keV.[153, 155]

Skalierung des Drucks des Randschichtpedestals

Zur Extrapolation des Drucks an der Pedestalspitze wurde aus Datenpunkten der *PDB3V2* Datenbank ein Skalierungsgesetz ermittelt:[33]

$$p_{ped} = 2.41 \cdot 10^3 \left(\frac{M}{n_{ped,20}} \right)^{1/3} \frac{R^{4/3}}{a^4} \frac{I_{p,MA}^2}{\left(\frac{1+\kappa^2}{2} \right)^{7/3}} (1 + \delta)^{3.2} \kappa^{3.62} A^{-2.94} \left(\frac{P_{tot}}{P_{LH}} \right)^{0.06} \quad (3.20)$$

Für ITER wurde anhand von Gl. 3.20 ein Pedestaldruck von 105 kPa vorausgesagt, daraus resultiert ein Wert für die Pedestaltemperatur von $T_{ped} = 5,3 \text{ keV}$.[33]

²⁴In der Frühdesignphase für DEMO1 sind empirische MMSG'e ein erster praktikabler Ansatz zur Abschätzung des Energieeinschlusses, unter Verzicht auf komplexe Transportrechnungen im Kernplasma. Die Extrapolierbarkeit der Datenpunkte vieler kleinerer Tokamaks ist - verglichen mit DEMO1 - kaum gegeben, da es sich vorwiegend um schwach abstrahlende, kurzpulssige Niedrigdichteplasmen handelte. Erweiterungen dieses Skalierungsgesetzes um abweichende Effekte, welche empirisch bei stark gespitztem Dichteprofil im Hauptplasma (*density peaking enhancement*) sowie bei hohen Dichtepegeln (*density roll-over*) gefunden wurden, werden im Anh. C.3 thematisiert.

²⁵Für ITER wird in einer Arbeit von Cordey *et al.* vorausgesagt, dass, je nach Verlustmechanismus, i.e. dominiert durch ELMs (MHD-Limit) bzw. thermische Wärmeleitung, zwischen 28 und 50% der im Plasma gespeicherten Energie im Pedestal gespeichert werden.[24]

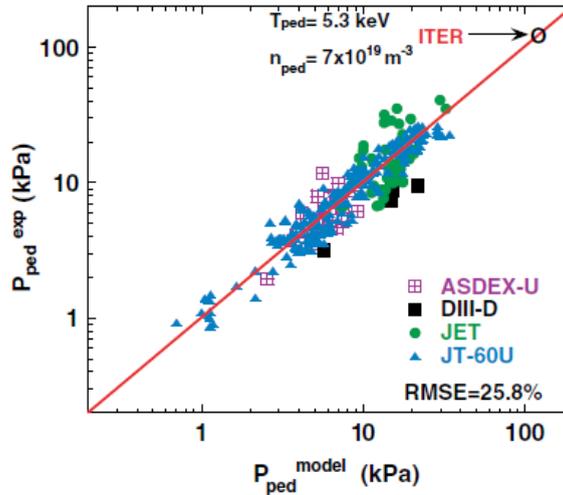


Abbildung 3.3.: Vergleich zwischen Werten des Pedestaldrucks innerhalb der *PDB3V2*-Datenbank unter Verwendung des Modells nach Gl. 3.20.

Das untersuchte Szenario war dabei jenes mit einem Verstärkungsfaktor der Leistung von $Q = 10$, einem Plasmastrom von $I_{p,MA} = 15$ MA sowie einer Pedestaldichte von $n_{ped} = 0,7 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-3}$.

Greenwald-Dichtegrenze

Eine hohe Plasmadichte im Kernplasma ist für ein Kernfusionskraftwerk eine Notwendigkeit, da sie sowohl über die Anzahl und mittlere Distanz möglicher Stoßpartner die Reaktionsrate für Kernfusion bestimmt, i.e. $P_{Fus} \propto \bar{n}^2$, als auch den verbesserten Energieeinschluss begünstigt, gemäß der IPB: $H_H \propto \bar{n}^{0,41}$, sowie das für die nachhaltige Leistungsabfuhr benötigte Regime des *Divertor-Detachments* herbeiführt, gemäß Stangeby: $T_t \propto n_{sep}^2$. [33, 133]

Neben technischen Begrenzungen (Brennstoffzufuhr, magnetischer Druck) existieren auch phys. Begrenzungen wie das *Greenwald-Limit*, i.e.

$$n_G = \frac{I_p}{\pi a^2}, \quad (3.21)$$

welche eine empirisch entdeckte, weiche Randbedingung an die liniengemittelte Plasmadichte stellt; abhängig vom Plasmastrom I_p und vom Plasmaradius a (Abb. 3.4).²⁶[53] Oberhalb dieser Grenze kann es zu kritischen Instabilitäten kommen.²⁷

Beim *Greenwald-Limit* wird vermutet, dass die lokale Brennbedingung in der Randschicht durch einen lokalen Strahlungskollaps erlischt, was eine *Disruption*²⁸ zur Folge hat.

²⁶In der Randschichtmodellierung wird mit dem *Greenwald-Limit* typischerweise die Dichte an der Pedestalspitze beschränkt.

²⁷Eine weitere, empirisch abgeleitete Betriebsgrenze im Tokamak beschreibt den kritischen normalisierten Plasmadruck, i.e. $\beta_N = \beta a B_T I_p^{-1}$ (Troyn-Limit), dessen Wert von Troyn *et al.* zu $\beta_N \approx 0,028$ bestimmt wurde.[142]

²⁸Mit *Disruption* wird ein Ereignis bezeichnet, bei dem der magn. Plasmaeinschluss abrupt beendet wird, typischerweise durch rapide anwachsende MHD-Instabilitäten. Ein Survey über 2309 *Disruptionen*, welche in einer Dekade des Plasmabetriebs am JET auftraten, wurde von de Vries *et al.* publiziert.[31]

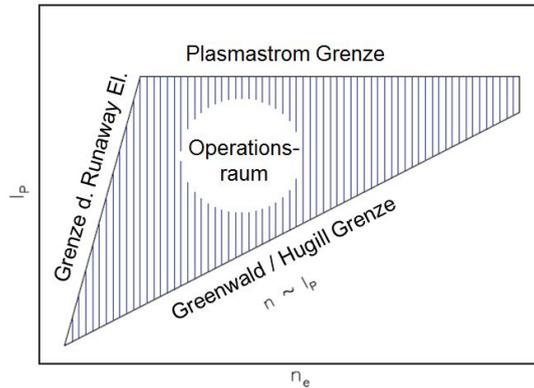


Abbildung 3.4.: Operationsraum für Tokamaks für die Kernplasmamaparameter Plasmastrom und Elektronendichte; bearbeitete Abb. aus der Arbeit von Greenwald.[53]

3.3. Tokamak

Mit Tokamak wird ein Reaktorkonzept bezeichnet, bei dem im gepulsten Betrieb, durch eine Überlagerung aus poloidalem und toroidalem magn. Feld, ein heißes, *nicht-ideales Plasma* zum Erreichen kontrollierter thermonuklearer Kernfusion eingeschlossen wird. Das Plasma ist typischerweise ein Gemisch aus den beiden Wasserstoffisotopen D und T. Für Reaktoren muss die Brennbedingung, i.e.

$$n_0 T_0 \tau_E > 5 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3} \text{ s keV}, \quad (3.22)$$

erfüllt sein, d.h. der Brennprozess des Plasmas muss selbstständig über die *Flat-Top-Phase* der Dauer eines Plasmapulses aufrecht erhalten werden können.²⁹[156]

3.3.1. Plasmaheizung

Dies bedeutet ferner, dass nur zu Beginn eines Plasmapulses das in die Brennkammer strömende Gas durch *externe Heizmethoden* zum Brennen gebracht werden muss. Die externen Heizmethoden bestehen aus der Ohm'schen Heizung sowie der Heizung durch äußere, resonante elektromagn. Wellen, und der Heizung durch injizierte Neutralteilchenstrahlen. Die *Ohm'sche Heizung* geschieht durch Widerstandsverluste des in der Plasmasäule induzierten Stroms. Dieser Mechanismus ist etwa bis 11k K effizient. Bei der Einkopplung resonanter Wellen durch äußere Gyrotrons wird zwischen Electron Cyclotron Resonance Heating (ECRH) und Ion Cyclotron Resonance Heating (ICRH) unterschieden. Bei der Neutralteilcheninjektion (NBI) wird ein Ionenstrahl im el. Feld beschleunigt und vorm Eintritt in die Brennkammer neutralisiert. Dieser wird auf ein Segment der Plasmasäule gerichtet, sodass er eine möglichst lange tangentielle Wegstrecke durchläuft, bei der Energie durch Reibung und Stöße auf Plasmateilchen übertragen wird.³⁰

²⁹Abb. C.1 im Anh. C.2 zeigt die Entwicklung des erreichten Tripelprodukts $nT\tau_E$ verschiedener Tokamaks im Vergleich mit der Entwicklung der Rechenleistung von Computerchips von 1965 bis 2000.

³⁰Eine Beschreibung des Status sowie Bedarfs an Forschung und Entwicklung für Kraftwerkstaugliche Systeme wurde von Franzen *et al.* publiziert.[44]

3.3.2. Geometrisches Prinzip

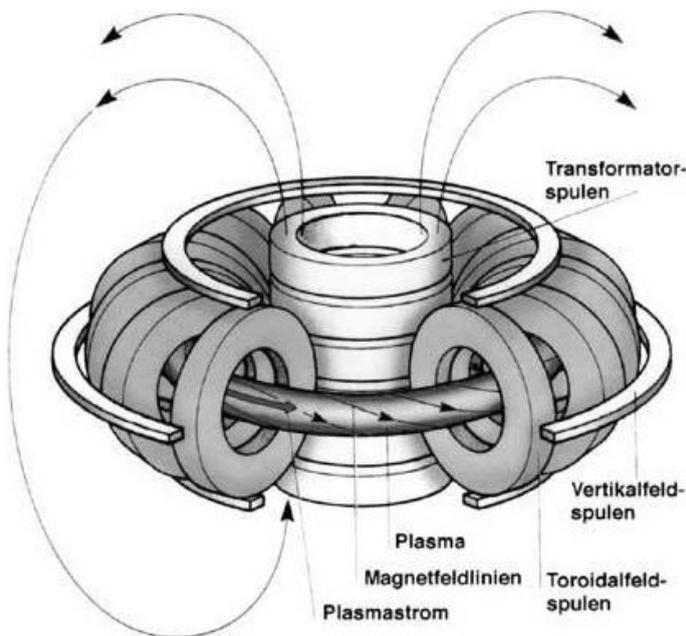


Abbildung 3.5.: Skizze des Tokamak-Prinzips; Abb. aus [151].

Abb. 3.5 zeigt eine Skizze des Tokamak-Prinzips. Geladene Plasmateilchen, i.e. Elektronen und Ionen, werden im Tokamak durch ein magn. Feld, bestehend aus toroidaler und poloidaler Komponente, für die Dauer τ_p (Teilcheneinschlusszeit) in der Plasmasäule eingeschlossen. Das toroidale Magnetfeld wird über fest angeordnete Toroidal-feldspulen, welche den Schlauch des Torus umschließen, vorgegeben.

Das poloidale Magnetfeld wird durch einen im Plasma getriebenen Starkstrom erzeugt, nach dem *Ampere'schen Gesetz*, i.e.

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \mu_0 \epsilon_0 \dot{\vec{E}}. \quad (3.23)$$

Der Strom wird wiederum durch eine Zentraltransformatorspule im Plasma induziert, nach dem *Induktionsgesetz*:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\dot{\vec{B}}. \quad (3.24)$$

Der endliche Flusshub der Zentraltransformatorspule führt zum gepulsten Betrieb des Tokamaks. Das Magnetfeld besteht aus ineinander geschachtelten Flussflächen (Gl. 3.28), i.e. \vec{j} und \vec{B} liegen auf Flächen mit konstantem Druck p sowie Durchfluss Γ (Abb. 3.6). Die letzte geschlossene magnetische Flussfläche wird als *Separatrix* bezeichnet. Diese wird durch einen aus der Wandebene herausragenden *Limiter* begrenzt.

3.3.3. Flussflächengeometrie

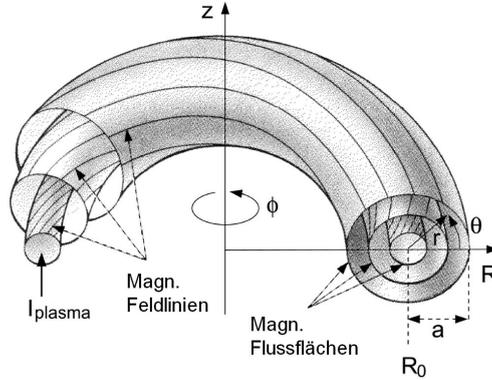


Abbildung 3.6.: Tokamak-Koordinatensystem und Darstellung der magn. Flussflächen; bearbeitete Abb. aus der Dissertation von Hartmann.³¹[59]

Grad-Shafranov-Gleichung

Die exakte Ausbildung der magnetischen Flussflächen in der Poloidalebene wird im Rahmen der MHD beschrieben.³² Im Gleichgewichtszustand gilt Kräftefreiheit auf das Plasma an jedem Ort, i.e.

$$\vec{\nabla} p = \vec{j} \times \vec{B}. \quad (3.25)$$

Für *axialsymmetrische Gleichgewichte*³³ in Tokamaks wird in Zylinderkoordinaten eine Funktion Ψ des poloidalen magnetischen Flusses definiert, für den gilt:

$$B \cdot \nabla \Psi = 0, \quad (3.26)$$

i.e. konstanter Durchfluss an jedem Ort einer Flussfläche. Unter Verwendung des *Amper'schen Gesetzes* lässt sich eine Funktion für den Stromdurchfluss definieren, zu

$$f = \frac{RB_\phi}{\mu_0}, \quad (3.27)$$

welche den Zusammenhang mit dem torodalen Magnetfeld B_ϕ beschreibt. Das toroidale Magnetfeld B_ϕ ist am inneren Bein der Toroidalfeldspulen maximal ($B_{\phi_{max}}$) und fällt zum Plasmazentrum und nach außen hin ab (Abb. 3.7), gemäß Freidberg:[45]

$$B_\phi(R) = B_{\phi_0} \left(\frac{R_0}{R} \right), \quad \text{mit} \quad B_{\phi_{max}} = B_\phi(R = R_0 - a - b), \quad (3.28)$$

mit B_{ϕ_0} : toroidales Magnetfeld auf der Plasma-Achse, R : Radius-Koordinate (Abb. 3.6), a : Plasmaradius, b : Dicke des Blankets zwischen der Toroidalfeldspule und der Brennkammer.

³¹Die abgebildete Querschnittsfläche mehrerer Flussflächen entspricht der Poloidalebene (Poloidalwinkel θ). Das Plasmazentrum bildet einen Ring in der Toroidalebene (Toroidalwinkel ϕ).

³²Die MHD beschreibt das Verhalten von elektrisch leitenden Fluiden, die von magnetischen (und elektrischen) Feldern durchdrungen werden.

³³Gleichgewichtszustände, die unabhängig vom Toroidalwinkel ϕ (entlang des Torus) sind.

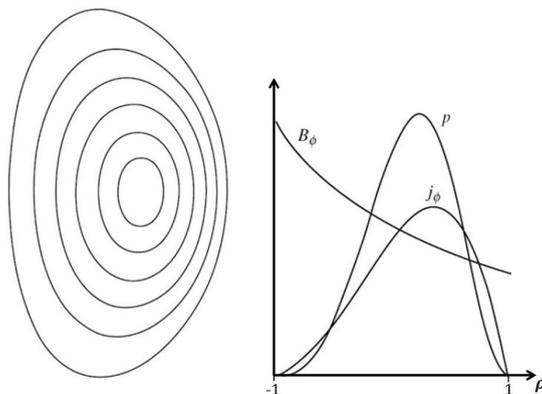


Abbildung 3.7.: Exakte Flussflächen (links) und Darstellung der toroidalen Stromdichte j_ϕ , des Plasma Drucks p sowie des toroidalen magn. Feldes entlang der *oberen Mittelbene*; bearbeitete Abb. aus dem Buch von Wesson.³⁴[156]

Der radiale Magnetfeldgradient führt zu einem Versatz der magnetischen Flussflächen hin zur Niedrigfeldseite (NFS), i.e. der *Shafranov-Shift* (Abb. 3.7). Für die *Grad-Shafranov-Gleichung* in Zylinderkoordinaten, i.e.

$$R \frac{\partial}{\partial R} \frac{1}{R} \frac{\partial \Psi}{\partial R} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial R^2} = -\mu_0 R^2 p'(\Psi) - \mu_0^2 f(\Psi) f'(\Psi), \quad (3.29)$$

existieren exakte analytische Lösungen im axialsymmetrischen Tokamak.³⁵[131]

Elongation und Vertikalinstabilität

Moderne Divertor-Tokamaks sind typischerweise nicht axialsymmetrisch in der Poloidalebene (Abb. 3.7), sondern ellipsoidförmig und vertikal elongiert. In der Realität ist das Plasma zu keiner Zeit ideal stationär. Vielmehr kommt es beim rotierenden und schwingenden Kernplasma zu Mikroinstabilitäten und Schwerpunktsverlagerungen. Zur Korrektur vertikaler Versätze werden die Poloidalfeldspulen gezielt angesteuert. Die Zeit, die ein solches Diagnostik- und Aktuator-system zur Lagekorrektur benötigt, beschränkt die maximale, stabil betreibbare Elongation κ_{95} , der 95 %-Flussfläche der *Plasmasäule* gemäß Zohm *et al.* zu:[161]

$$\kappa_{95} = 1,5 + \frac{0,5}{(A - 1)}. \quad (3.30)$$

Beim Überschreiten dieser Maximalelongation kommt es zur *Vertikalinstabilität*.

³⁴Der Radius ρ ist auf Flussflächen normiert und entspricht nur dann dem norm. Radius $\rho = r/a$, wenn im axialsymmetrischen Fall der *Shafranov-Shift* vernachlässigt wird.

³⁵Maschke formulierte die Grad-Shafranov-Gleichung für beliebiges Aspektverhältnis $A = R_0/a$. [101]

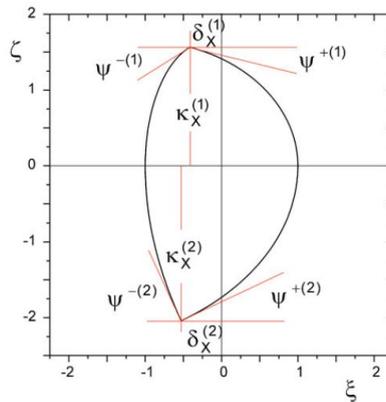


Abbildung 3.8.: Poloidaler Plasmaquerschnitt des Codes HELIOS.[72]

Abb. 3.8 zeigt exemplarisch den Plasmaquerschnitt des Codes HELIOS.[72] Das Ellipsoid ist typischerweise unsymmetrisch, d.h. vertikal gesehen aus zwei Halbellipsen mit unterschiedlichen Halbachsen zusammengesetzt. In erster Näherung wird das Plasma durch die mittlere Elongation κ_X sowie Triangularität δ_X beschrieben.³⁶

3.3.4. Divertor

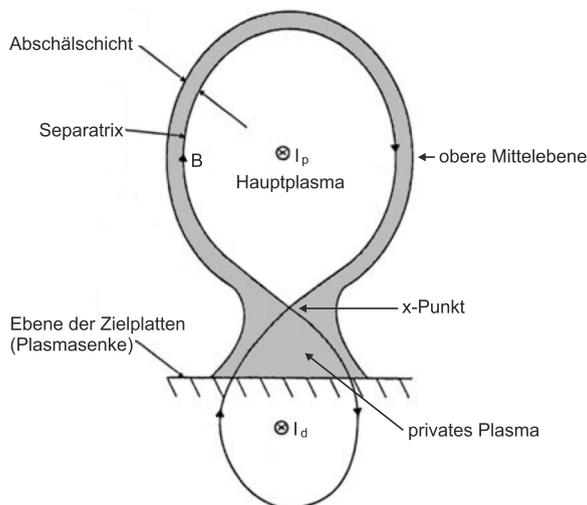


Abbildung 3.9.: Poloidalquerschnitt eines *Divertorplasmas*; nachbearbeitete Skizze aus dem Buch von Stangeby.[134]

³⁶Zwischen Wand und Separatrix existiert ein Bereich offener Feldlinien, der SOL, entlang derer Teilchen (und Leistung) gezielt abgeführt werden.

Zur verbesserten Teilchen- und Leistungsabfuhr werden moderne Kernfusionsreaktoren mit *Divertoren* ausgestattet. Der Name rührt dabei daher, dass die magnetische Konfiguration im Boden der Brennkammer durch zusätzliche Divertorspulen so verändert wird, dass geladene Teilchen entlang offener magn. Feldlinien, gezielt auf zwei Targetplatten *umgeleitet* (engl.: *diverted*) werden (Abb. 3.9).

Zwischen Haupt- und Divertorplasma wird durch Überschneidung der offenen Feldlinien der *x-Punkt* ausgebildet. Teilchen werden durch die magnetische Konfiguration scharf und sehr lokal auf die Zielplatten geführt. Dabei wird von benetzter Fläche oder von *Strike Points* gesprochen. Die hier abgeführten Leistungsflussdichten liegen im Bereich einiger MW pro m².

Divertor-Detachment

Zum Schutz des Divertors ist es nötig, in ein physikalisches Regime zu gelangen, welches als *Divertor-Detachment* bezeichnet wird. Das *Bohm-Kriterium* besagt, dass Ionen im SOL, über den Druckgradienten entlang der magnetischen Feldlinien, bis zum Eintritt in die Schicht vor der leitenden Wand des Divertors, auf lokale Ionenschallgeschw. beschleunigt werden.

Da Druck das Produkt aus Temperatur und Teilchendichte ist, kann der Druckgradient auch erreicht werden, indem die Temperaturen am Divertor ($z = L_{\parallel}$) erheblich kleiner sind, als an der oberen Mittelebene ($z = 0$), während die Dichten entlang z zwar zunehmen, aber derart, dass der Druck entlang z abfällt.

Das *Detachment* zeichnet sich dadurch aus, dass aufgrund der hohen Dichten, gute Bedingungen für volumetrische Rekombination, für Leistungsabstrahlung durch Stoßanregung, sowie für *Wärmeverluste* durch Reibung zwischen Ionen und Neutralen vorherrschen. Experimentell wurde am JET beobachtet, dass die Temperatur T_t an den Targetplatten des Divertorplasmas über die Dichte n_u an der oberen Mittelebene eingestellt werden kann, gemäß Stangeby gilt: $T_t \propto n_u^{-2}$. [133]

3.3.5. Radialer Aufbau

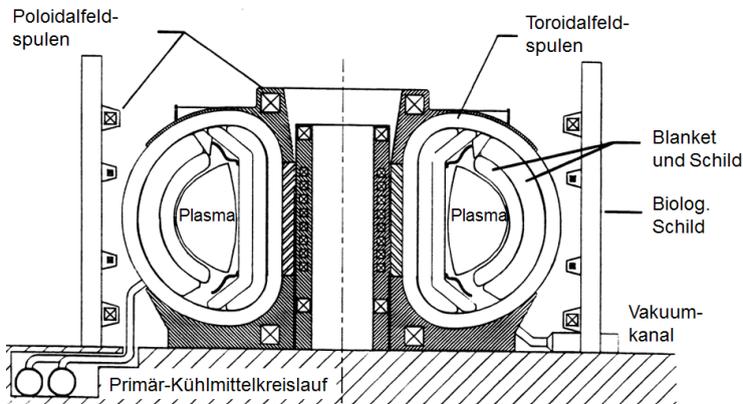


Abbildung 3.10.: Querschnitt eines möglichen radialen Aufbaus eines Tokamak-Reaktors; bearbeitet, Original aus der ARIES-I von Najmabadi *et al.*. [108]

Abb. 3.10 zeigt den radialen Aufbau eines Tokamak-Reaktors (am Beispiel von Advanced Reactor Innovation and Evaluation Study (ARIES)-I).

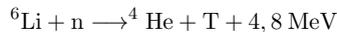
Vom Plasma aus betrachtet grenzt an radialer Position auswärts zunächst das Reaktorblanket an, welches aus der ersten Wand besteht, die plasmaseitig typischerweise mit 2-3 mm W beschichtet ist.[12] Dahinter liegt eine Zone mit einem Material zur Neutronenvervielfachung ($n,2n$), z.B. Pb oder Be in flüssiger oder fester Form, sowie dem mit ${}^6\text{Li}$ angereicherten Brutmaterial.

Die erste Wand (dient auch als Moderator für Brutneutronen) und die Brutzone sind mit Kühlleitungen zur Wärmeabfuhr durchzogen.

Weiter außen besteht das Blanket noch aus einem Schild aus Strukturmaterial, typischerweise *EUROFER* oder *P-97*-Stahl. Das Schild dient zur Abschirmung der dahinterliegenden Toroidal-feldspulen vor Neutronen und Strahlung. Hinter dem Schild grenzt die Wand des Vakuumpfäßes an, hinter der die umschließenden Toroidal-feldspulen lokalisiert sind.

3.3.6. Tritium-Brutrate

Die zum Erbrüten des primären Brennstoffs T bevorzugte Brutreaktion (Gl. 3.5):



wird in Kap. 3.1.1 diskutiert. Diese geschieht in dafür vorgesehenen Brutzonen des Reaktor-Blankets (Kap. 3.3.5).

In Europa werden mehrere Varianten von Brutblanketsystemen untersucht, die sich entweder im Kühlmittel unterscheiden, i.e. Wasser oder He, oder aber in der Form des eingebrachten Li unterscheiden, i.e. entweder in Form eines flüssigen Gemischs aus Pb und Li, oder aber durch geschüttete Feststoffkugeln aus Li und Be.³⁷ In beiden Fällen dient Pb bzw. Be als Neutronen-vervielfacher ($n,2n$).[11]

Die T-Brutrate eines Kernfusionsreaktors ist definiert als

$$TBR = \frac{\text{T Generierungsrate im Brutblanket}}{\text{T Verbrauchsrate im Plasma}}; \quad (3.31)$$

weiterhin wird für ein Kraftwerk stets die tatsächlich *benötigte Brutrate* ($TBR_{req} > 1$) angegeben.

Aufgrund der Beschaffenheit der ersten Wand kommt es beim Durchdringen zu Verlusten von Brutneutronen durch parasitären Neutroneneinfang, vorwiegend in der plasmaseitigen Wolframschicht. Die für Transmutationsreaktionen verbrauchten Neutronen stehen der dahinter liegenden Brutzone des Blankets anschließend nicht mehr zum Brüten zur Verfügung.

Weiterhin können Öffnungen (*Port Plugs*) für Plasmadiagnostiken dazu führen, dass es Anteile der Wandoberfläche gibt, hinter denen keine Zonen mit Brutmaterial vorgesehen sind, i.e. Neutronen, welche *Port Plugs* passieren, können nicht zum Brüten von T genutzt werden.

Zusätzlich wird typischerweise der Bereich des Divertors nicht zum Brüten verwendet, aufgrund der dort prioritären Notwendigkeit technologische Lösungen für die enorme Leistungsabfuhr bereitzustellen. Der Divertor bedeckt typischerweise einige Prozent der Oberfläche der ersten Wand in der Brennkammer des Haupttraums.

Die für DEMO1 *benötigte Brutrate* wurde bereits in dedizierten Studien zu $TBR_{req} > 1,15$ berechnet.

³⁷Heliumgekühlt, mit flüssigem Pb-Li-Brüter: Helium Cooled Lithium Led (HCLL); Beschreibungen durch Jordanova *et al.* sowie mit keramischem Li-Brüter: Helium Cooled Pebble Bed (HCPB), Konzept publiziert von Pereslavytsev *et al.*; wassergekühlt, mit flüssigem Pb-Li-Brüter: Water Cooled Lithium Lead (WCLL), Status des EU-Konzepts publiziert von del Nevo *et al.* (2015); Doppelt gekühlt: Dual-Coolant Lithium Lead (DCLL), Konzept durch Norajitra *et al.*[73, 74, 114, 32, 111] Boccaccini *et al.* fassten den allgemeinen Status der *DEMO-Blanket-Systeme*, die im Rahmen von *EUROfusion* entwickelt werden, zusammen.[11]

Dazu wurde der 3-d kinetische Monte-Carlo N-Particle Transport Code (MCNP) verwendet. Dieser ist in der Lage, Details der Oberflächenbeschaffenheit zu modellieren. Die Unterschiede zwischen Rechnungen in 1-d bzw. 3-d lagen bei 15 – 20 %.[124]

Tritium-Startinventar eines Kernfusionskraftwerks

Kernfusionskraftwerke benötigen ein Startinventar an T, welches mit einer Halbwertszeit von 12,3 Jahren zerfällt. Cristescu *et al.* sagen für den im Bau befindlichen ITER ein benötigtes Startinventar von $\approx 3\text{kg T}$ vorraus; Tanabe berechnete jenes für DEMO zu $\approx 4\text{--}10\text{kg T}$. [26, 138]

3.4. Plasma-Wand-Wechselwirkung

Die PWW wird in Tokamaks durch physikalische und chemische Erosion der Wandoberfläche, welche durch aufprallende Ionen und Neutralteilchen verursacht wird, bestimmt.³⁸

3.4.1. Zerstäubung

Als Zerstäubung wird der Abtrag von Festkörpermateriale bezeichnet, welcher durch Kontaktprozesse mit einem angrenzenden Medium geschieht. Im Falle der ersten Wand in der Brennkammer eines Tokamaks ist das angrenzende Medium sowohl das Plasma, als auch das kühlere Gas in der Plasmarandschicht.

Eckstein untersuchte exp. und durch Modellierung diverse Zerstäubungsausbeuten (ZA'en) für verschiedene Projektil-Target-Kombinationen. Die ZA'en $Y(E, \theta)$, gemessen in von dem Targetmaterial erodierten Atomen pro Beschuss durch ein Ionenprojektil, hängen dabei von der Beschaffenheit und dem Material des Targets ab, sowie von der Energie E und dem Aufprallwinkel θ der Projektilionen.[36]

Stoßkaskaden im Festkörperrgitter führen aufgrund des Impulsübertrags beim Aufprall eines Projektils, zur Freisetzung eines oder mehrerer gebundener Oberflächenatome, falls dabei mindestens die Bindungsenergie, die das Atom im Gitter hält, aufgebracht wird.

Folglich benötigen leichte Projektilen, wie D oder T, beim Aufprall auf schwermetallische Targets, wie etwa einer mit W beschichteten ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer, höhere Energien zur Zerstäubung, als schwerere Projektilen. Der beim Stoß übertragene Energieanteil $(1 - f_E)$ eines Projektils der Masse m_1 , ist beim elastischen Stoß mit einem ruhenden, schweren Target der Masse m_2 , definiert durch

$$1 - f_E = 1 - \frac{\left(\frac{m_1}{m_2} - 1\right)^2}{\left(\frac{m_1}{m_2} + 1\right)^2}. \quad (3.32)$$

Der übertragene Energieanteil $(1 - f_E)$ ist daher bei gleichen Massen $m_1 = m_2$ exakt eins, allerdings bei D ($m_1 = 2 u$) auf W ($m_2 = 184 u$) etwa $(1 - f_E) = 0,043$. Es existiert daher für jede Projektil-Target-Kombination eine charakteristische *Zerstäubungsschwelle*, i.e. eine Projektilenergie, unterhalb derer es nicht zur Zerstäubung kommt.

³⁸Die chemische Zerstäubung ist für Wolfram - im Gegensatz zu Kohlenstoff - vernachlässigbar. Da die Erosionsstudien dieser Arbeit sich auf eine mit W beschichtete erste Wand beziehen, wird ausschließlich der Mechanismus der phys. Zerstäubung modelliert.

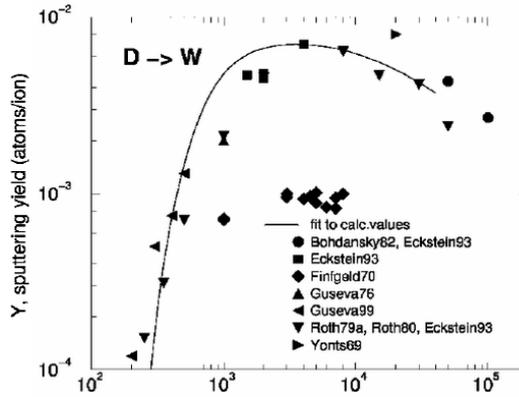


Abbildung 3.11.: Zerstäubungsausbeute (ZA), i.e. erodierte Atome pro auftreffendes Ion; aus Eckstein für $D \rightarrow W$ im Energieraum.[36]

Abb. 3.11 zeigt, dass diese Schwelle für $D \rightarrow W$ bei einer Projektilenergie von etwa 250 eV liegt.

3.4.2. Einfallswinkel beim Wandaufprall

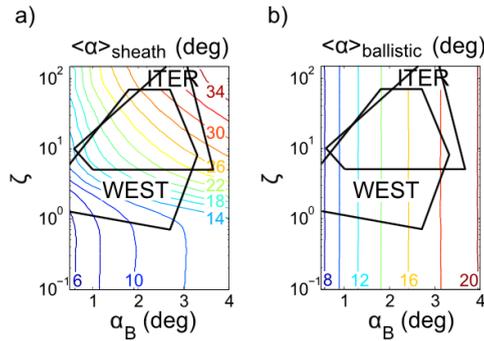


Abbildung 3.12.: Mittlerer Aufprallwinkel von Ne^{4+} mit a) magn. Schicht b) einem ballistischen Modell; Original von Mellet.[103]

Die Winkel der Ionen beim Wandaufprall sind auf der ersten Wandoberfläche im Hauptraum nicht homogen verteilt, da teilweise magn. Feldlinien bereits im Hauptraum die Oberfläche mit sehr flachen Inklinationswinkeln von $\alpha_B = 3 - 6^\circ$ berühren; diese verlaufen großflächig betrachtet jedoch quasiparallel zur Wand.

Folglich wird ein sehr großer Teil der Ionen im Hauptraum nicht direkt auf die erste Wand geführt. Vielmehr gyrieren die Ionen beim quasiparallelen Anflug um die magn. Feldlinien, wodurch sie in den Wirkungsbereich des magn. und el. Feldes der Vorschicht bzw. Schicht gelangen. Innerhalb der Schicht werden die Ionen zur Oberflächennormalen hin beschleunigt.

Gemäß Mellet *et al.* ergeben sich dadurch Einfallswinkel von ca. $20^\circ - 30^\circ$ beim Tungsten (W) Environment in Steady-state Tokamak (WEST) sowie beim ITER, Abb. 3.12).[103]

3.4.3. Co- und Redeposition

Neben dem schädigenden Mechanismus der Zerstäubung können auf die Wand auftreffende Ionen auch auf der Wandoberfläche deponiert werden. Handelt es sich dabei um zuvor erodiertes Wandmaterial, so wird von *Redeposition* gesprochen, wobei zwischen prompter und nicht-prompter Redeposition unterschieden wird.[41]

Bei der *prompten Redeposition* wird der Mechanismus von prompt nach der Erosion auf die Wand zurückkehrendem sowie deponierendem Material bezeichnet. Die prompte Redeposition wird zum Einen über das Verhältnis aus Ionisationsweglänge λ_{iz} und Gyroradius ρ_i festgelegt,³⁹ zum Anderen aber auch über das Verhältnis aus Impuls in Richtung Plasmazentrum und Feldbeschleunigung auf die Wand in der *Vorschicht*.⁴⁰

Eine erste Berechnungsformel, ohne Berücksichtigung der Rolle der Vorschicht für höher ionisiertes W, wurde von Fussmann *et al.* publiziert. Tskhakaya und Groth sowie Mellet *et al.* publizierten neuere Erkenntnisse, die darauf hindeuten, dass die Vernachlässigung der Felder zum signifikanten Unterschätzen der *prompten Redeposition* führen kann.[144, 103] Anhand eines Vergleichs zwischen Particle-in Cell (PIC)-Simulationen mit dem *BIT1*-Code⁴¹ und Entladungen an den Tokamaks *Alcator C-MOD* und dem JET, wurde in guter Approximation die folgende Fitformel gefunden:[47]

$$f_{\text{prompt}} \approx \left(\alpha \frac{\lambda_{iz} T_i}{\rho_i T_e} \right)^{-1}, \quad (3.33)$$

mit dem Fitparameter $\alpha = 0.01$ sowie dem Larmor-Radius ρ_i (Gl. 3.18) und der mittleren freien Weglänge für *Elektronenstoßionisation* (Gl. 3.11).

Die Gültigkeitsbedingung für obige Fitformel (Gl. 3.33) ist, dass die Kraft, die aufgrund des el. Schichtpotenzials auf die wandnah ionisierten Atome wirkt, größer ist, als die aufgrund des Magnetfeldes wirkende Lorentz-Kraft.

Von *Codeposition* wird gesprochen, wenn zusätzlich zum zuvor erodierten Wandmaterial, Wasserstoff oder He mit in die oberste Schicht der Wandoberfläche eingebunden werden bzw. dort deponieren.

Selbsterstäubung

Insbesondere - aber nicht nur - stark ionisiertes Wandmaterial, welches aus tieferen Plasmazonen zurück auf die Wand transportiert und in der Schicht beschleunigt wird, kann neben der Möglichkeit zu Redeponieren, auch durch den hohen Impulsübertrag beim Wandaufprall, zur zusätzlichen *Selbsterstäubung* führen.

3.4.4. Erste Wand im Hauptraum der Brennkammer

Stand Frühjahr 2017 wird die passende Beschaffenheit der ersten Wand für DEMO intensiv diskutiert.

³⁹Dies geschieht typischerweise durch einfach erodierte Wandatome, die wandnah, i.e. innerhalb ihres Larmor-Radius, ionisiert werden. Das prompt geborene Ion wird dann im Zuge der Gyration um eine wandnahe magnetische Feldlinie auf die erste Wand zurückgeführt und dort redeponiert. Durch Transport- und Driftbewegungen kann auch höher ionisiertes Wandmaterial zurückkehren und redeponieren.

⁴⁰Die mittlere Ionisationswegstrecke λ_{iz} wird durch die Plasmaparameter im äußeren SOL bestimmt, i.e. durch die Elektronentemperatur sowie -dichte. Der Gyroradius wird wiederum durch die Stärke des magnetischen Feldes dicht vor der Wand, welches von den Toroidalfeldspulen vorgegeben wird, sowie durch die Masse bestimmt.

⁴¹*BIT1*: quasi-2D elektrostatischer PIC/MC-Code für Neutrale, Elektronen und Ionen; Details in Tskhakaya und Groth.[143]

Einigkeit herrscht darüber, dass die erste Wand in weiten Teilen der Gesamtoberfläche mit W bedeckt sein wird. Einerseits aufgrund der besseren Wärmeleitfähigkeit von W, verglichen mit Stahl, andererseits aufgrund des hohen Schmelzpunktes sowie den vergleichsweise niedrigen Zerstäubungsausbeuten.

Begrenzung der Wolfram-Schichtdicke

Neben den positiven Eigenschaften des Wolframs, besitzt dieses als parasitäre Eigenschaft einen hohen Wirkungsquerschnitt für Neutroneneinfang. Für ein Fusionskraftwerk folgt die Notwendigkeit, das für den Plasmabetrieb benötigte T, während des Betriebs selbst zu erzeugen.⁴² Damit die benötigte *Tritium-Brutrate* ($TBR_{req} > 1,15$) erreicht werden kann, ist die Schichtdicke der Wolframzone der ersten Wand nach Bolt *et al.* auf 2-3 mm beschränkt.[12] Eine Unterschranke bildet hier die mittlere Eindringtiefe eines Wärmepulses, die bei etwa $50 \mu\text{m}$ liegt.

Für die im Rahmen dieser Arbeit getätigten PWW-Studien wurde eine erste Wand gewählt, welche aus 2 mm W, geschichtet auf einem typischen Strukturmaterial wie *EUROFER* oder *P97*-Stahl, besteht. Zwischen der reinen W- und Stahlschicht wurde in Anlehnung an Weber *et al.* noch eine 1 mm Dicke *linear gradierte Übergangsschicht*, auch *Functionally Graded Material* (FGM), angenommen.[149, 150]

Weitere Legierungen, etwa zur Bildung *selbst-passivierender Oxidschichten*⁴³ oder zur Formierung einer *T-Permeationsbarriere*[115], wurden für diese Studien vernachlässigt.

In SA wird angepeilt, dass sich Oxidschichten erst im Unfallszenario ausbilden, sodass das Plasma im Normalbetrieb, aufgrund *präferenzialer Zerstäubung* leichterer Legierungselemente, im Kontakt mit einer nahezu reinen Wolframoberfläche steht.⁴⁴

Lebensdauer der ersten Wand

Die erste Wand wird durch den Energieeintrag von hochenergetischen Neutronen geschädigt; dies führt zu Versetzungen von Gitteratomen, gemessen in dpa. Dieser Mechanismus wird im Folgenden als *Neutronenschädigung* bezeichnet.

Weiterhin wird die erste Wand durch aufprallende Neutralteilchen sowie Ionen aus dem Plasma zerstäubt. Diese Art der Schädigung wird im Rahmen dieser Arbeit modelliert und als *PWW-Schädigung* bezeichnet.

Beschränkung durch Neutronenschädigung

Die Berechnung der Neutronenschädigung der ersten Wand von DEMO1 ist nicht Teil dieser Arbeit. In der EFDA-Roadmap wird der Betrieb des Start- bzw. Nachfolgeblankets an DEMO1 bis zu einer Neutronenschädigung von 20 bzw. 50 dpa vorgesehen.⁴⁵[42]

Die Neutronenschädigung an DEMO1 (2 GW Fusionsleistung) beträgt etwa 10 dpa pro fpy.

⁴²Pro GW Fusionsleistung und pro fpy werden 56 kg T benötigt; Rechnung in Anh. C.1.

⁴³Schichten aus W-Cr-Y sind hier sehr verheissungsvolle Kandidaten zum Schutz beim LOCA, um die Oxidationsraten von radioaktivem Wolframtrioxid (WO_3) zu unterdrücken. Nach Wegener *et al.* sind die Massenteile solcher Komponenten etwa W-12Cr-0,6Y.[152]

⁴⁴Litnovsky *et al.* dazu: „During regular operation, the preferential sputtering of alloying elements by plasma ions should leave almost pure tungsten surface facing the plasma. Under accidental conditions, the alloying elements in the bulk will form an oxide layer protecting tungsten from mobilization“.[96]

⁴⁵1 dpa entspricht gemäß Mößblang einem Beschuss durch $1,5 \cdot 10^{24}$ Neutronen pro m^2 , wobei die Neutronen die Energie $E_n = 14,1 \text{ MeV}$ tragen.[105]

Die Lebensdauer des Blankets durch Neutronenschädigung ist gleich der Zeit t_{op} von Inbetriebnahme bis zum Austausch des Starter- bzw. Nachfolgeblankets, i.e.

$$t_{op} = 2 \text{ fpy} \quad \text{bzw.} \quad 5 \text{ fpy.} \quad (3.34)$$

Beschränkung durch PWW-Schädigung

Für die *effektive Lebensdauer* $t_{FW,PWW}$ der ersten Wand, die durch die PWW beschränkt ist, wird nicht die vollständige Zerstäubung der äußeren Wolframschicht, sondern der Verlust der thermomechanischen Eigenschaften zugrunde gelegt.

Dies wurde im Rahmen der Modellierung dieser Arbeit durch ein 10 %-Limit approximiert, i.e. die *effektive Lebensdauer* wird bei einem 10 %-igen Abtrag der plasmaseitigen Wolframschicht erreicht; dies entspricht einem Abtrag einer mittleren Schichtdicke von $200 \mu\text{m}$ W.

Eignungskriterium

Als Eignungskriterium für Plasmamaparameter, welche Einfluss auf die Zerstäubung der ersten Wand nehmen, wird angenommen, dass die effektive Lebensdauer $t_{FW,PWW}$, welche durch PWW-Schädigung begrenzt wird, die *vorgesehenen Austauschzeiten* t_{op} für das Starterblanket, welche sich aufgrund der Neutronenschädigung ergeben, überschreitet, i.e.

$$t_{FW,PWW} \geq t_{op}. \quad (3.35)$$

3.5. DEMO1-Designparameter

Mit *EUROfusion* wird ein europäisches Konsortium zur Entwicklung von Fusionsenergie bezeichnet, welches 30 Forschungseinrichtungen zur Repräsentierung der 26 europäischen Mitgliedsstaaten, plus die Ukraine und die Schweiz, umfasst.⁴⁶

EUROfusion koordiniert die Verteilung finanzieller Mittel für europäische Forschungsprojekte, welche im Rahmen der EFDA-Roadmap durchgeführt werden.[127]

DEMO1 ist der Arbeitstitel des von *European Fusion Development Agreement* (EFDA) Power Plant Physics and Technology (PPPT) für EUROfusion erstellten Designs eines gepulsten *Demonstrationskraftwerks*, welches zum Ziel hat, in sämtlichen notwendigen, technologischen sowie physikalischen Aspekten zu demonstrieren, dass sich ein vollumfängliches Kraftwerk mithilfe dieser Technologie realisieren und sicher betreiben lässt.⁴⁷

Das *Baseline Design* für DEMO1 wurde im Jahr 2015 von PPPT mithilfe des europäischen Codes PROCESS erarbeitet.⁴⁸

Die *Frühdesignphase* des europäischen DEMO1 läuft bis 2021, eine Bauentscheidung soll im Jahr 2035 gefällt werden und der Plasmabetrieb wird bis 2050 angepeilt.[127, 42]

⁴⁶Zuvor wurde bereits im Jahr 1999 der Vorläufer European Fusion Development Agreement (EFDA) ins Leben gerufen. In den 1970er Jahren schlossen sich führende Einrichtungen der europäischen Fusionsforschung zusammen, um den JET zu realisieren.

⁴⁷Anders als bei ITER, welches als erster Meilenstein zu einem Kernfusionskraftwerk noch weltweit gemeinschaftlich umgesetzt wird, existieren verschiedene Pläne von DEMOs; in Korea, China und Japan werden eigene Varianten entwickelt. In Russland existieren Konzepte für einen Kernfusion-Kernspaltung-Hybrid als DEMO-Variante. In Europa wird zwischen DEMO1 und DEMO2 unterschieden.

⁴⁸PROCESS wird in der *Power Plant Technology Unit* des Culham Centre for Fusion Energy (CCFE) in Culham (UK) unter der Führung von Dr. Richard Kemp (zuvor von Prof. Dr. David Ward) zur DEMO-Modellierung verwendet.

Wesentliche Teile der Studien und Auswertungen, welche im Rahmen dieser Arbeit vorgenommen wurden, beziehen sich *einheitlich*⁴⁹ auf eine Standard-Referenz für DEMO1, das europäische *Baseline Design*. Dieses Design wird in Deutschland regelmäßig diskutiert und begleitet. Turnusmäßig (1-2 mal pro Jahr) diskutieren rund 40 Wissenschaftler aus den Max-Planck-Instituten in Garching und Greifswald, dem KIT Karlsruhe sowie dem Forschungszentrum Jülich, über den neuesten Forschungsstand von DEMO-Physik und -Technologie. Dabei werden auch von der europäischen Strategie abweichende Designs diskutiert.⁵⁰ Für die PWW-Studien der Physik der Randschicht spielen solche Variationen eine Nebenrolle, ebenso wie unterschiedliche Profilformen von Dichte und Temperatur im Kernplasma. Vielmehr sind in der Randschicht der Plasmatransport, die Beschaffenheit des Pedestals im H-Moden-Betrieb sowie der mittlere *Wandabstand* (der Separatrix) und die Dichte und Temperatur ab dem Pedestal auswärts, von erheblicher Bedeutung.

Tabelle 3.1.: Wesentliche DEMO1-Designparameter.[127, 124, 43, 129, 155, 10]

Parameter	Wertebereich (publiziert)	Referenzwert	Einheit
R_0	9 – 9,5	9	m
a	2,25 – 3,65	2,643	m
A	2,6 – 4	3,4	-
P_{Fus}	1794 – 2074	2000	MW
P_{SOL}	150 – 154	150	MW
I_p	17 – 20	19,6	MA
q_{95}	3 – 3,25	3	-
H_H	1,1	1,1	-
B_0	5,24 – 7,36	5,7	T
κ_{95}	1,59	1,59	-
δ_{95}	0,33	0,33	-
$\langle n \rangle$	0,77 – 1,43	0,83	10^{20} m^{-3}
T_{sep}	300 – 330	300	eV

Tab. 3.1 zeigt publizierte DEMO1-Designparameter für Reaktoren einer ähnlichen Größe, i.e. $R_0 = 9 - 9,5$ m, mit variierendem Aspektverhältnis sowie schwankender Fusionsleistung, i.e. $P_{Fus} = 1794 - 2074$ MW. Die für diese Arbeit abgeleiteten Referenzwerte sind an das europäische *Baseline Design* des Jahres 2015 angelehnt und werden nachfolgend als *Baseline Parameter* bezeichnet.

3.5.1. Betriebsfenster

Neben den in Tab. 3.1 dargestellten *Baseline Parametern*, welche vorwiegend ein möglichst ökonomisches DEMO1-Design darstellen, gibt es für das Plasma-Szenario Einschränkungen durch Betriebsgrenzen (Kap. 3.2.8), welche sowohl physikalischer, als auch technologischer Natur sind.

Die Verlässlichkeit der momentan verfügbaren Skalierungsgesetze für den Pedestaldruck ist innerhalb der für DEMO relevanten Parameterbereiche ungewiss, i.e. die Dichte und Temperatur des Pedestals können dadurch nur schwach vorhergesagt werden.

⁴⁹Eine Ausnahme bildet der DEMO-Fall der Benchmark-Rechnungen zwischen EIRENE und CELLSOR; Kap. 5.

⁵⁰Biel *et al.* zeigten mithilfe eines Systemcodes, dass auch DEMO-Designs mit deutlich längeren, als zweistündigen Plasmapulsen, möglich wären; durch bis zu 25% grösseren Maschinenradius (R_0) und den damit einhergehenden Platz für die Zentraltransformatorschule.[10]

Die Dichte kann allerdings über das *Greenwald-Limit* sowie die Bedingungen für den Übergang zum *Detachment*, an der Pedestalspitze nach oben und an der Separatrix nach unten beschränkt werden. Dadurch lässt sich ein Fenster für mögliche Dichtewerte des Pedestals ableiten. Gleichzeitig kann mithilfe der Skalierung des Pedestaldrucks die passende Temperatur abgeleitet werden. Für *Baseline Parameter* ergibt sich nach Gl. 3.21 die Greenwald-Dichte zu

$$n_G \approx 9 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}. \quad (3.36)$$

In der ursprünglichen Publikation ging Greenwald von einer Obergrenze der liniengemittelten Dichte des Kernplasmas aus. Mittlerweile wird die bei hohen Dichten getriggerte Instabilität eher Effekten im Randschichtplasma zugeordnet, daher findet man in vielen Publikationen zu DEMO-Designs Dichten, die das Greenwald-Limit um 10 – 20 % überschreiten, basierend auf der Annahme, dass dies für sehr gespitzte Dichteprofile im Kernplasma geschieht, was wiederum durch ein Brennstoffzufuhr-System, welches gefrorene Pellets tiefer ins Plasma injiziert, als dies durch wandseitigen Gaseinlass möglich wäre, realisiert werden konnte. Momentan (Stand April 2017) werden, unter verstärkter Berücksichtigung der Diagnostik und Kontrolle des DEMO1-Plasmas, teilweise kleinere Werte diskutiert, welche eine Obergrenze der lokalen Dichte an der Pedestalspitze, i.e.

$$n_{ped,max} = 0,85 \cdot n_G \approx 7,6 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}, \quad (3.37)$$

nicht überschreiten sollten.⁵¹

Die Untergrenze für die Dichte an der Separatrix, i.e. $n_{sep,min}$, wird über das im H-Moden-Betrieb benötigte Regime des Detachments, welches für eine zuverlässige Leistungsabfuhr benötigt wird, festgelegt.

Abschätzungen durch ein vereinfachtes *2-Punkt-Modell* (Gl. 5.118 im Buch von Stangeby[134]), i.e. eine Modellierung zwischen den Verhältnissen an der oberen Mittelebene im Hauptraum sowie an den Divertor-Targets, ergeben eine weiche Untergrenze der Separatrixdichte von $n_{sep,min} \approx 4 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$; für *Baseline Parameter* (Tab. 3.1).

⁵¹Ein analoges Vorgehen wird auch aus Gründen der Unterdrückung von ELMs für die *H-Moden-Einschlussgüte* (Faktor H_H) diskutiert.

Kapitel 4.

Modellierung der Plasma-Wand-Wechselwirkung im Hauptraum der Brennkammer

Im Kapitel Grundlagen (Kap. 3) wurden die verschiedenen Wechselwirkungsmechanismen zwischen einem metallischen Festkörper (Wand) und einem angrenzenden Plasma beschrieben. Die Wandkomponenten der Brennkammer werden sowohl durch auftreffende Ionen, als auch durch Neutralteilchen beschädigt.

Schädigende Ionenspezies sind jene des Brennstoffs (D, T), der Fusionsasche (He), der *Seeding Gase*¹ (N, Ne, Ar, Kr, Xe) und jene, welche durch Wanderosion das Plasma verunreinigen (Fe, W).

Bei den Neutralen schädigen primär Brennstoffatome die Wand, welche durch CX-Stöße zwischen kalten Atomen und Ionen, in heißen Plasmabereichen entstehen.² Diese können anschließend mit kin. Energien im keV-Bereich auf die erste Wand zurückkehren; dieser Mechanismus wurde bereits in den Studien zum ITER von Behrisch *et al.* als höchst relevant eingestuft.³[7]

Die Entstehungsrate und auch die exakte Energieverteilung schädigender Neutralteilchen hängt wiederum stark von Parametern der Plasmarandschicht ab. Die Temperatur ist dabei für die Energie sowie die Ionisationswahrscheinlichkeit der Neutralen verantwortlich, während die Dichte deren Abbremsung, d.h. konkret die Wahrscheinlichkeit weiterer CX-Stöße, innerhalb des Pedestals sowie des einige 10 eV kalten Scrape-Off-Layer (SOL), festlegt.

Eines der Ziele von globalen Studien im Gleichgewichtsfall ist es Kombinationen aus Transportstärke senkrecht zu den Magnetfeldlinien, aus Randschichttemperatur und -dichte sowie des Wandabstands *in* $1,5\text{-}d^4$ zu finden, die für DEMO1 eine hinreichende Lebensdauer der ersten Wand erlauben.⁵ Die Transportstärken legen dabei den radialen Dichteverlauf im SOL fest.

¹Die Leistung wird im SOL sehr scharf (auf wenige mm) entlang der magn. Feldlinien auf die Divertortargets - sog. *Strike Points* - abgeführt. Dabei werden Leistungsflussdichten im Bereich mehrerer MW pro m^2 erreicht. Zur Reduktion der Wärmeflussdichten werden an Divertor-Tokamaks wie dem JET und Axialsymmetrisches Divertor-Experiment Upgrade (AUG) gezielt Verunreinigungsgase ins Divertorplasma eingeblasen, welche die abgeführte Leistung durch stoßangeregte Linienstrahlung ins Volumen abstrahlen und so helfen die Wärmeflussdichten an den Targetplatten erheblich zu reduzieren. Dabei gelang es bereits, mehr als 80 % der abgeführten Leistung abzustrahlen.[9]

²Das Massenverhältnis beträgt im Falle von D bzw. T (Projektil) zu W (Target) 1 zu 92 bzw. zu 61.

³Neutralteilchen lassen sich nicht im Magnetfeld einsperren, sie *fliegen* nahezu unabgebremst auf die erste Wand und führen dort zur Zerstäubung.

⁴Die Reaktionsraten sowie die Plasmabeschreibung in CELLSOR erfolgt zwar in 1-d, der Dichteverlauf des 1-d Plasmahintergrunds im SOL wird jedoch iterativ durch Lösung der *Kontinuitätsgleichung* in 1,5-d bestimmt. Die halbe Dimension entspricht einer effektiven Zeitkonstante, welche den Ionentransport im SOL entlang der offenen Feldlinien zum Divertor beschreibt. Die Profile sind stetige Funktionen in der Radiuskoordinate senkrecht zu den magnetischen Feldlinien.

⁵Das Modell sollte sich prinzipiell auch für DEMO2 anwenden lassen. Der *Dauerbetrieb* ist bei *Advanced Tokamaks* mit einem hohen nicht-induktiven Stromtrieb theoretisch denkbar;[139, 76, 70] eine Skalierung des Bootstrap-Anteils am Stromtrieb wurde von Gi *et al.* publiziert.[50] Der *normale* Betrieb ist durch den endlichen Flusshub der Zentraltransformatorspule, welcher hier zum Stromtrieb verwendet wird, gemäß Biel *et al.* auf Pulsdauern von 2-12 Stunden begrenzt; je nach Maschinendesign.[10] Die Pause zwischen zwei Pulsen beträgt ca. 30 Minuten. Diese werden zum Umladen der Zentraltransformatorspule und zum Evakuieren der Brennkammer benötigt. Der effektiv erreichbare Operationszeitanteil beträgt daher für DEMO1 vorraussichtlich $f_{duty} = 0.8 - 0.96$. Dabei gilt: je größer der Torus, desto mehr Platz für die Zentraltransformatorspule sowie zur Abschirmung der Toroidalfeldspulen, desto länger die Pulsdauern und desto besser der Teilcheneinschluss.

4.1. Plasmabeschreibung

Zur vereinfachten Modellierung des Plasmas wird jenes axialsymmetrisch (poloidal sowie toroidal) und im thermischen Gleichgewicht betrachtet. Ein Plasma im thermischen Gleichgewicht lässt sich als Fluid über die Dichte n sowie die Temperatur T der Elektronen und Ionen in Abhängigkeit der Radiuskoordinate r beschreiben.

In magnetisch eingeschlossenen Plasmen verlaufen Dichte sowie Temperatur typischerweise von einem Maximalwert im Zentrum des eingeschlossenen Bereichs radial nach aussen hin abfallend. Dabei werden zwei Zonen unterschieden, eine vom Zentrum ausgehend breite Zone, bei der der Verlauf parabolisch abfallend ist, sowie der linear abfallende Randbereich, welcher in sehr gut eingeschlossenen Plasmen, i.e. solchen im Regime der *High-Confinement-Mode* (H-Mode), beobachtet und als *Pedestal* bezeichnet wird.

Im SOL fallen Dichte und Temperatur in radialer Richtung in etwa exponentiell ab. Die Stärke des Abfalls wird durch die Abfalllängen $\lambda_{T_{1,2}}$ und λ_n vorgegeben.

Zur eindimensionalen Modellierung wird die Temperatur folgendermaßen beschrieben:

$$T(r) = \begin{cases} T_{ped} + (T_0 - T_{ped}) \left(1 - \left(\frac{r}{r_{ped}}\right)^2\right)^{\alpha_T} & \text{falls } r \leq r_{ped}, \\ mr + b & \text{falls } r_{ped} < r \leq a, \\ \max \left\{ T_{sep} e^{\left(\frac{-(r-a)}{\lambda_{T_1}}\right)}, T_{min} \right\} & \text{falls } r > a \text{ und } T > T_{min}, \\ T_{min} e^{\left(\frac{-(r-a)}{\lambda_{T_2}}\right)} & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.1)$$

mit

$$m = \frac{T_{sep} - T_{ped}}{\Delta_{ped}}, \quad b = T_{sep} - ma. \quad (4.2)$$

Der Abfall im *Scrape-Off-Layer* (SOL) wird durch den Parameter T_{min} auf eine Minimaltemperatur beschränkt.⁶

Für die Dichte gilt:

$$n(r) = \begin{cases} n_{ped} + (n_0 - n_{ped}) \left(1 - \left(\frac{r}{r_{ped}}\right)^2\right)^{\alpha_n} & \text{falls } r \leq r_{ped}, \\ mr + b & \text{falls } r_{ped} < r \leq a, \\ n_{sep} e^{\left(\frac{-(r-a)}{\lambda_n}\right)} & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.3)$$

mit

$$m = \frac{n_{sep} - n_{ped}}{\Delta_{ped}}, \quad b = n_{sep} - ma. \quad (4.4)$$

Im Falle der Dichte kann für $r > a$ auch, alternativ zur Verwendung von λ_n , die Stärke des diffusiven (D_{\perp}) sowie konvektiven (v_{\perp}) Senkrechttransports, sowie eine effektive Zeit zum Abtransport zum Divertor (τ_{\parallel}) vorgegeben werden. In diesem Fall wird durch Lösen der Kontinuitätsgleichung das (Ionen-)Dichteprofil selbstkonsistent errechnet (Kap. 4.5).⁷

⁶Typischerweise liegt diese im Bereich einiger eV.

⁷Für die Nettoerosionsstudien (Kap. 6) wurde diese Option verwendet.

4.2. Schädigung durch Neutralteilchen: der Monte Carlo Code CELLSOR

Der 1-d MC-Code CELLSOR wurde gezielt geschrieben, um die Fragestellung des Schutzes der ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer eines Kernfusionsreaktors, in integrierte Systemstudien, welche mithilfe von *Systemcodes* zur Reaktorauslegung durchgeführt werden, einzuführen (Kap. 2). CELLSOR wurde in der Sprache *python 2.7* geschrieben, unter Verwendung von *cython* und *numerical python*, welche Routinen in *Fortran* enthalten sowie die Kompilierung in *c* ermöglichen und damit eine erhöhte Rechenleistung gegenüber *python* ermöglichen. Einige der Gleichungen und Beschreibungen von CELLSOR, die in diesem Kap. auftauchen, wurden bereits von Beckers *et al.* publiziert.[6]

CELLSOR wurde mit Hilfe von Prof. Dr. Detlev Reiter, Dr. Dirk Reiser und Dr. Vlad Kotov in vielen Aspekten an den Code EIRENE angelehnt.⁸ CELLSOR löst stationäre kinetische Gleichungen in 1-d (radial) durch Rechnungen im 7-d Phasenraum (Ort \vec{r} , Impuls \vec{p} , Teilchenzustand i), welcher durch kartesische Orts- und Impulsvektoren aufgespannt wird und beschreibt die Teilchenbahnen algebraisch in einem 3-d Torus; dies geschieht zur Mitnahme von Krümmungseffekten, welche Einfluss auf die *Winkelverteilung*⁹ beim Wandaufprall haben.¹⁰ Diese Behandlung erlaubt zügige Rechnungen mit winkelabhängigen Zerstäubungsausbeuten (ZAn) $Y(E, \theta)$.

4.2.1. Geometrie

In Maschinen mit toroidalen Plasmaformen, wie dem Tokamak oder dem Stellarator, fliegen neutrale Teilchen entlang gerader Linien durch den gekrümmten Torus und *durchstoßen* dabei Flussflächen verschiedener Radien.¹¹

Das von zwei Flussflächen mit benachbarten Radien eingeschlossene Volumen entspricht in der MC-Rechnung einer Zelle am Ort ρ mit der Breite Δ_{cell} . Die erste Wand entspricht dabei der äußersten Flussfläche bei ρ_{wall} . In jeder Zelle herrscht Stationarität des Plasmahintergrundes, i.e. $n, T(\rho_{cell}) = konstant$.

Annahmen und Vereinfachungen

CELLSOR wurde als Werkzeug zur Berechnung der mittleren, globalen Nettoerosion im Hauptraum der Brennkammer, im stationären Fall entwickelt. Durch eine Reihe von Vereinfachungen konnte die Rechenzeit des Codes dazu optimiert werden.

⁸Hilfe wurde inhaltlich in Form von wissenschaftlichen Diskussionen geleistet; im Falle von Prof. Dr. Detlev Reiter darüber hinaus über die Durchführung der EIRENE-Läufe der Benchmark-Rechnungen. Die Entwicklung bzw. Programmierung von CELLSOR wurde allein von M. Beckers vorgenommen. Die Kontinuitätsgleichung im SOL, i.e. Gl. 4.71 - 4.86 (Abschn. 4.5), wurde von Prof. Dr. Mikhail Tokar gelöst.

⁹Die Winkelverteilung ist gemäß Eckstein von hoher Bedeutung, da die Zerstäubungsausbeuten von leichten Projektilen, die eine schwermetallische Wand bombardieren, stark vom Aufprallwinkel abhängen.[35, 36]

¹⁰Die Teilchenbahnen werden in 3-d im kartesischen Torus beschrieben. Messgrößen werden in 1-d (radial) über die Zellen gemittelt.

¹¹Simulierte Testteilchen (TT) haben aufgrund der Toruskrümmung und ihrer geradlinigen Richtung sowie Geschwindigkeit stets eine endliche Verweilzeit innerhalb einer Zelle. Die Verweilzeit legt die Wahrscheinlichkeit für physikalische Interaktionen mit dem stationären Hintergrundplasma fest, also die Eindringtiefen für diverse Stoßprozesse. Zur Bestimmung der Verweilzeit t_{dwell} wird ein Algorithmus verwendet, der erlaubt Schnittpunkte zwischen geraden Linien und Flussflächen zu bestimmen. Dieser Algorithmus wird in Kap. 4.2.1 beschrieben.

1. Das Plasma in CELLSOR ist axialsymmetrisch, d.h. der poloidale und toroidale Querschnitt des Plasmas wird durch eine *kreisrunde Form*¹² beschrieben.¹³
2. Flussflächen sind konzentrisch und invariant vom Poloidalwinkel angeordnet (Abb. 4.1), d.h. der aus der MHD resultierende *Shafranov-Shift* (Kap. 3 Abb. 3.7), der die Flussflächen auf der Hochfeldseite (HFS) staucht und auf der NFS streckt, wird vernachlässigt.¹⁴
3. In CELLSOR starten simulierte Testteilchen (TT) auf Höhe der *oberen Mittelebene* der HFS.¹⁵ Dies gilt sowohl für initial auftreffende Ionen, als auch für injizierte Brennstoff-Pellets bzw. Gasatome.
4. Radiale Driften und Plasmabewegungen (Kap. 4.2.2) werden innerhalb der Zellen der MC-Rechnung vernachlässigt. Das Hintergrundplasma wird lokal durch ein ruhendes, stationäres Teilchenensemble beschrieben; innerhalb diesem folgen die Geschwindigkeiten einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung (MBV).
5. Zur Bestimmung der Gesamtzerstäubung der ersten Wand wird über sämtliche errechneten *lokalen ZA*, die über den Aufprall von TT mit Punkten der Wandoberfläche berechnet werden, summiert; über diese wird am Ende einer MC-Rechnung gemittelt.
6. Das durch die Kopplung von kinetischer Rechnung mit den Lösungen der Fluidgleichungen ermittelte Profil der Ionendichte beschreibt die *mittlere Dichte* zwischen *x-Punkt* und oberer Mittelebene (entlang der *z*-Koordinate).¹⁶
7. Die Oberfläche der ersten Wand wird als *glatt*¹⁷ und *homogen*¹⁸ angenommen.
8. Magn. Feldlinien verlaufen in CELLSOR parallel zur ersten Wandoberfläche, d.h. *lokale Erosionseffekte* aufgrund von Berührungen zwischen magnetischen Feldlinien und Oberflächen, werden - ebenso wie führende Kanten durch Kastellierungen der Oberfläche - nicht berücksichtigt.¹⁹
9. Die plasmaseitige Wandoberfläche besteht vollständig aus einer dünnen Wolframschicht, i.e. mögliche Legierungen (z.B. *W-Y-Cr[152]*) aus SAs, werden nicht behandelt.²⁰

¹²Die typische D-förmige ellipsoide Form, mit unterschiedlicher Elongation und Triangularität (Kap. 3 Abb. 3.8) in der Poloidalebene von Plasmen heutiger Divertor-Tokamaks, wird vernachlässigt; für globale Studien spielt die exakte Plasmaform keine Rolle.

¹³Zur Skalierung bestimmter *Randschichtparameter*, wie dem Pedestaldruck, der Energieeinschlusszeit sowie der H-Moden-Leistungsschwelle, werden - auf Grund der hohen Sensitivität - jedoch die Formparameter (Elongation, Triangularität) des DEMO1-*Baseline-Designs* (Kap. 3.5) verwendet.

¹⁴Aus diesem Grund entspricht die Radiuskoordinate *x* in CELLSOR automatisch der Flussflächenkoordinate Ψ .

¹⁵An dieser Stelle sind die Unterschiede zwischen D-Form und Kreis am geringsten.

¹⁶Typischerweise treten starken Dichte- und Temperaturgradienten entlang der *z*-Koordinate erst im Divertorplasma, i.e. zwischen *x-Punkt* und den Targetplatten, auf.

¹⁷Andersen *et al.* beobachteten im experimentellen Reaktorbetrieb, dass zuvor polierte, glatte Wandkomponenten durch den Plasmakontakt aufrauen, wodurch unter anderem das Zerstäubungsverhalten verändert wurde.[4]

¹⁸Anstelle einer glatten und stetigen Wand (wie in CELLSOR) werden plasmaseitige Oberflächen in der Praxis kastelliert; zur Vermeidung von Spiegelströmen und zur Anpassung an den Einfall von magn. Feldlinien.

¹⁹In einer globalen Betrachtung werden solche lokalen Effekte nicht berücksichtigt. Da der Flächenanteil der lokalen Erosion jedoch gering ist, spielen diese Effekte eine kleine Rolle. Dies gilt explizit nicht, falls die Fragestellung die Erosion an führenden Kanten oder lokalen Gefäßöffnungen von Plasmadiagnostiken betrifft, wie bei Tokar *et al.*[141]

²⁰Die *präferentielle Zerstäubung*[30] leichter Legierungen gegenüber der Zerstäubung von W führt nach Litnovsky *et al.* im Plasmabetrieb dazu, dass SAs im stationären Fall eine dünne, plasmaseitige Schicht aus nahezu reinem W ausbilden.[96]

10. CELLSOR betrachtet den *stationären Fall* vollständigen Wandrecyclings.²¹
11. Der initiale Ionenfluss auf die Wand wird monoenergetisch beschrieben. Die Berechnung erfolgt über ein vereinfachtes 0-d-Modell für das beschleunigende Potenzial der Debye-Schicht (Schicht). Neutralteilchen starten anschließend von der Wand; die Verteilungen für Austrittswinkel und -geschwindigkeit werden einerseits aus dem reflektierten Anteil des Ionenflusses und andererseits aus dem desorbierenden Anteil thermischer Moleküle generiert.
12. Die ZA, d.h. implizit die Bindungsstärke von Atomen im Wandgitter, wird - analog zur Glattheit der Oberfläche - als *zeitliche Invariante* (stationär über den Plasmapul) behandelt.²²
13. Die *Selbstheilung* der durch Bombardierung geschädigten ersten Wand, welche durch *prompte Redeposition* von erodiertem W erfolgt, wird ausschließlich für einfach ionisiertes W^+ berechnet.
14. Der SOL wird vereinfacht als Quader mit den Kantenlängen Δ_{SOL} , $2\pi R$ und $2\pi a$ behandelt, bei dem die tatsächliche Verbindungslänge L_{\parallel} für Ionen zwischen der oberen Mittelebene und dem x-Punkt (bzw. Divertor), um den Sicherheitsfaktor q_{95} länger ist, als die halbe Kantenlänge πR in z-Richtung (Kap. 4.5 Abb. 4.3). Ionen propagieren daher mit einer effektiven Schallgeschwindigkeit $c_{s,eff}$.²³ Im Modell wird dies durch die Verwendung einer mittleren effektiven Verlustzeitkonstante $\tau_{\parallel} = \pi R c_{s,eff}^{-1}$ erreicht.
15. Im Kernplasma wird Gleichheit zwischen Elektronen- und Iontemperatur angenommen. Innerhalb des SOL erlaubt CELLSOR eine faktorielle Unterscheidung (über den Parameter $\tau_{e,i}$).
16. Die Temperatur beim Eintritt in die Schicht des Divertors beträgt $T_e = T_i = 2 \text{ eV}$.²⁴ Die mittlere Schallgeschw. wird anhand der über den SOL gemittelten Iontemperatur, i.e. $\bar{T} = \int_{\Delta_{SOL}} d\rho T(\rho)$, ermittelt. Dabei beschreibt $T(\rho)$ - analog zur Dichte - eine entlang z gemittelte Temperatur.
17. Eine weitere Annahme liegt darin, dass die entlang z gemittelte Temperatur im Hauptraum nur schwach variiert, und dass der starke Gradient zwischen oberer Mittelebene und dem Plasma dicht vor den Divertorplatten, erst im privaten Plasma, i.e. divertorseitig ab dem x-Punkt, zustande kommt.

²¹Der Nettotransport in der Wand sollte tatsächlich über annähernd die gesamte *Flattop-Phase* der Plasmapulse gleich Null sein; die *Sättigung* geschieht auf Grund der zweistündigen Plasmapulsdauer an DEMO1.

²²Abweichende Bindungsstärken von co- und redeponierten Schichten werden nicht betrachtet; ebenso wie Veränderungen durch zunehmende Rauigkeit. Der aufgrund dieser Annahme begangene Fehler ist typischerweise klein. Die Ursache liegt darin, dass für DEMO sowie ITER, zum Schutz der Wand, eine Vergrößerung des Wandabstandes gegenüber dem Standard heutiger Tokamaks vonnöten sein dürfte. Dadurch dürfte das wandnahe Plasma im Hauptraum der Brennkammer dünner und kälter sein, wodurch aufgrund der erhöhten Wegstrecken für Stoßionisation nur schwache prompte Redeposition erwartet wird.

²³Der Ausdruck für die Ionenschallgeschw. c_s aus Kap. 3 Gl. 3.9 wird daher mit dem Sicherheitsfaktor q_{95} sowie der mittleren Mach-Zahl \bar{M} multipliziert. Verwendet wird ein polytroper Koeffizient $\gamma_i = 1, 5$.

²⁴Dies ist nicht direkt für die CELLSOR-Rechnungen erheblich, sondern für die Abschätzung der minimalen Separatrixdichte im Hauptraum, welche über ein *2-Punkt-Modell* nach Stangeby erfolgt.[133]

Schnittpunkte zwischen Geraden und Torusoberflächen

Zur Bestimmung der physikalischen Reaktionsraten der TT mit dem Hintergrundplasma, welche durch die Verweilzeit des TT in einer Zelle bestimmt werden, wird ein Algorithmus zur Lösung quartischer Polynome, welche die Schnittpunkte zwischen Geraden und außen und innen liegenden Flussflächen beschreiben, verwendet.

In kartesischen Koordinaten in 3-d wird ein Torus mit großem Radius R und Plasmaradius a , flach in der xy -Ebene liegend und bei $x = 0$ zentriert, durch folgende Gl. beschrieben:[137]

$$f(x, y, z) = (x^2 + y^2 + z^2 - \rho^2 - R^2)^2 + 4R^2(z^2 - \rho^2). \quad (4.5)$$

Jeder Punkt, der auf der Oberfläche mit Radius ρ liegt, erfüllt die implizite Gl.

$$f(x, y, z) = 0. \quad (4.6)$$

Die kin. Beschreibung von Neutralteilchen erfolgt algebraisch durch eine Gerade, beschrieben durch den Positionsvektor \vec{p} und den Geschwindigkeitsvektor (Richtungsvektor) \vec{v} , der durch die Flugzeit t aufgespannt wird, i.e.

$$\vec{r} = \vec{p} + t\vec{v}. \quad (4.7)$$

Die Schnittpunkte zwischen der Neutralteilchengerade und umgebenden Flussflächen können über die *Nullstellen*²⁵ des zugehörigen quartischen Polynoms bestimmt werden (Abb. 4.1).

Sie geben die Flugzeiten t an, um die der Geschwindigkeitsvektor \vec{v} aufgespannt werden muss, um auf einen Punkt auf der Torusoberfläche zu zeigen. Durch *Nullsetzen* von Gl. 4.5 und durch Einsetzen der Komponenten des Geradenvektors \vec{r} aus Gl. 4.7, erhält man das gesuchte quartische Polynom

$$t^4 + at^3 + bt^2 + ct + d = 0 \quad (4.8)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} a &= \frac{2\beta}{\alpha} \\ b &= \frac{\beta^2 + 2\alpha\gamma + 4R^2v_z^2}{\alpha^2} \\ c &= \frac{2\beta\gamma + 8R^2p_zv_z}{\alpha^2} \\ d &= \frac{\gamma^2 + 4R^2p_z^2 - 4R^2\rho^2}{\alpha^2} \end{aligned} \quad (4.9)$$

und

$$\begin{aligned} \alpha &= \vec{v} \cdot \vec{v} \\ \beta &= 2\vec{p} \cdot \vec{v} \\ \gamma &= (\vec{p} \cdot \vec{p}) - \rho^2 - R^2. \end{aligned} \quad (4.10)$$

²⁵Es gibt zahlreiche Methoden um die Nullstellen von quartischen Polynomen zu ermitteln, darunter geschlossene algebraische und analytische Lösungen. Derartige in sich geschlossene Lösungen neigen allerdings zu numerischen Instabilitäten, welche unter speziellen Vorzeichenkombinationen der vier Koeffizienten a , b , c und d auftreten. Nimmt man das gemeinsame Potenzial der gängigen algebraischen und analytischen Lösungen (in geschlossener Form), so lassen sich nach Herbison-Evans davon lediglich Fälle mit 12 von den 32 möglichen Vorzeichenkombination zuverlässig lösen. Das Spektrum der zu erwartenden Vorzeichenkombination für im Torus propagierende Neutralteilchen geht aufgrund der zahlreichen isotropen Richtungswechsel, die nach CX-Stößen zwischen den simulierten TT und dem Plasmahintergrund auftreten, weit über diese 12 Fälle hinaus.[62]

Ein numerisch stabiler und zügiger algebraischer Algorithmus, zur Bestimmung der Nullstellen von Polynomen höherer Ordnung, besteht darin die Eigenwerte einer sogenannten *Begleiter-Matrix* (engl.: *companion matrix*) zu ermitteln. Dabei werden die Nullstellen von quartischen Polynomen, wie jenem aus Gl. 4.8, numerisch nach Edelman und Murakami berechnet:[37]

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -d \\ 1 & 0 & 0 & -c \\ 0 & 1 & 0 & -b \\ 0 & 0 & 1 & -a \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Die ermittelte Verweilzeit in einer Zelle hängt von der Auflösung, also der Anzahl und damit der Breite Δ_{cell} der Zellen ab, sowie von der Länge des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} , i.e. der kinetischen Energie des TT. Die Verweilzeit wird mit t_{dwell} bezeichnet. Ermittelt wird stets die kleinste positive reelle Nullstelle der beiden benachbarten *Begleiter-Matrizen* $C(\rho_{aus})$ und $C(\rho_{in})$.²⁶

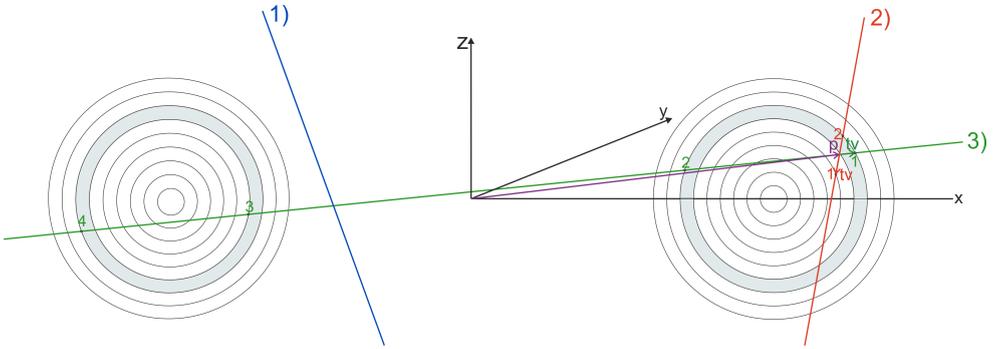


Abbildung 4.1.: Darstellung der Nullstellen von C_{aus} , welche die Schnittpunkte zwischen dem Geschwindigkeitsvektor \vec{v} des am Ort \vec{p} startenden TT und der benachbarten Flussfläche angeben. Im Falle zweier reeller Nullstellen (rot) sowie von 4 reellen Nullstellen (grün) entspricht die positive reelle Nullstelle der Verweilzeit in der Zelle.²⁷

²⁶Die investierten Rechenkosten sind bei dieser Vorgehensweise akzeptabel, so bekommt man die gesuchte kleinste positive reelle Nullstelle beider Matrizen mithilfe von *eigvals* in $< 300 \mu s$.

²⁷Im Quellcode von CELLSOR wird zur Ermittlung der Nullstellen $t_{1,2,3,4}$ die *eigvals*-Methode aus dem *numpy*-Paket (*numerical python*) verwendet. Mathematisch entsprechen diese Nullstellen Skalaren, die die Geschwindigkeitsvektoren \vec{v} der simulierten TT gerade so aufspannen, dass diese auf die Schnittpunkte mit der Torusoberfläche des Radius ρ zeigen. Je nachdem, ob der Positionsvektor ursprünglich innerhalb oder außerhalb der benachbarten Torusoberfläche liegt, und auch abhängig von der Richtung des Geschwindigkeitsvektors, gibt es entweder 4 reelle Nullstellen, oder jeweils 2 reelle und 2 imaginäre Nullstellen, oder gar 4 imaginäre Nullstellen. Da die TT sich innerhalb der äußersten Torusoberfläche (erste Wand) befinden und immer die Schnittpunkte mit Flussflächen gesucht werden, die bei Radien knapp unter- / oberhalb des Positionsvektors in der betrachteten Zelle liegen, werden nur Lösungen mit reellen Nullstellen verwendet. Wenn man sich vorstellt, dass ein vertikal und symmetrisch durchgeschnittener Torus bei frontaler Sicht exakt zwei Kreise im Abstand $2R_0$ erzeugt, so leuchtet direkt ein, dass bei Flugrichtungen mit Schnitten an beiden Kreisen vier, und bei Schnitten an einem Kreis zwei reelle Nullstellen als Lösungen vorliegen. Als weitere Einschränkung wird nur jene reelle Nullstelle verwendet, welche in Flugrichtung des TT liegt, d.h. mit positivem Vorzeichen. Die Nullstelle entspricht dann der Verweilzeit des TT innerhalb einer Zelle (Abb. 4.1).

Wandreflektion

Die erste Wand im Hauptraum der Brennkammer entspricht der äußersten Flussfläche mit dem Radius $\rho_{wall} = a + \Delta_{SOL}$.²⁸

In CELLSOR sind Winkel zwischen Neutralteilchengerade und ONV der Wand zu jeder Zeit bekannt, da sich jede Kombination aus Positions- und Geschwindigkeitsvektor eines TT, um eine skalare Flugzeit t_{wall} aufspannen lässt, die dem Schnittpunkt mit der Wandoberfläche entspricht. Auf diese Stelle auf der Wandoberfläche zeigt der Vektor $\vec{S} = \vec{p} + t_{wall}\vec{v}$. Mathematisch entspricht die kleinste reelle Nullstelle der *Begleiter-Matrix* C_{wall} der gesuchten Flugzeit bis zum Wandaufprall t_{wall} .

Diese Rechnung ist immer dann erforderlich, wenn sich die Richtung des TT, und damit der Einfallswinkel zur Wand, ändert. Dies geschieht bei

- Wechselwirkung mit dem Plasmahintergrund durch CX-Stöße,
- bei Wandberührung, im speziellen bei Reflektion oder Desorption von TT.

Die Desorption erfolgt beim Eintritt eines TT ins Plasma. Die Reflektion kann anschließend erfolgen, falls es zum Wandaufprall kommt, bevor das TT durch Ionisation in den Plasmahintergrund eintritt. Die Änderung des Geschwindigkeitsvektors nach einem Wandaufprall entspricht in der Algebra der Reflektion einer Geraden an einer Ebene. Zur Berechnung ist die Kenntnis über den Oberflächennormalenvektor (ONV) \vec{n} , der vom Ort des Schnittpunkts, beschrieben durch \vec{S} , nach innen, d.h. in den Torus hinein zeigt. Zur Berechnung wird \vec{S} in den negierten Gradienten von $f(x, y, z)$, der *impliziten Torusgleichung* (Gl. 4.5), eingesetzt, i.e.

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} -4S_x (S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 - a^2 - R^2) \\ -4S_y (S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 - a^2 - R^2) \\ -4S_z (S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 - a^2 - R^2) + 8R^2 S_z \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Die Reflektion von \vec{v} entspricht der Rotation von \vec{n} um den Winkel π .²⁹ Nach Anwendung der *vereinfachten Rotationsmatrix* um den Winkel π auf \vec{n} und \vec{v} ergibt sich der Reflektionsvektor v_{refl} aus

$$v_{refl} = \begin{pmatrix} v_x - 2n_x(\vec{n} \cdot \vec{v}) \\ v_y - 2n_y(\vec{n} \cdot \vec{v}) \\ v_z - 2n_z(\vec{n} \cdot \vec{v}) \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Der Einfallswinkel, i.e. der Winkel relativ zur ON, der zur korrekten Berechnung der ZA $Y(\theta, E)$ benötigt wird, ist gegeben durch

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{-\vec{v} \cdot \vec{n}}{|\vec{v}| |\vec{n}|} \right). \quad (4.14)$$

Monte-Carlo Zellen

Eine *Zelle* entspricht in CELLSOR dem Raum zwischen zwei benachbarten Flussflächen. Eine Zelle ist also ein 3-d Körper, anschaulich ein Ring in der poloidalen Ebene, welcher durch Rotation um den Ursprung des Koordinatensystems zu einem Torus aufgespannt wird.

²⁸Der Wandabstand Δ_{SOL} ist eine höchst wichtige Größe im Kontext der PW. Er bestimmt das Verhältnis der Teilchenzuflüsse zum Divertor und zur ersten Wand im Hauptraum sowie die wandnahe Physik, da er Einfluss auf die Plasmadichte und -temperatur hat.

²⁹Die *allgemeine Rotationsmatrix*, welche die Rotation um einen beliebigen Vektor in 3-d beschreibt, lässt sich enorm vereinfachen, wenn der Rotationswinkel exakt π beträgt.

Die Breite des Rings entlang des Torus bleibt dabei erhalten. Eine Zelle wird also aufgrund der poloidalen und toroidalen Symmetrie des simulierten Plasmagefäßes, hinreichend durch den Radius ρ_{cell} und die Zellbreite Δ_{cell} beschrieben. Zählvorgänge werden in jeder Zelle i beim Radius $\rho_{cell,i}$ durchgeführt.³⁰

Rückrotation des Orts- und Geschwindigkeitsvektors auf die x-Achse

Das Zählen innerhalb von Zellen geschieht beim Radius ρ_{cell} , i.e. gemittelt in poloidaler sowie toroidaler Richtung. Die exakte Position innerhalb der Zellen ist nur zur Bestimmung der Einfallswinkel zur Wand von Bedeutung.

Zur Rechenbeschleunigung kann daher mit Vektoren \vec{p} und \vec{v} , deren y - und z -Komponenten stets Null sind, gerechnet werden, indem nach jedem Zelldurchgang *Rückrotationen*³¹ um die überstrichenen Poloidal- und Toroidalwinkel Φ und θ , um welche das *Testteilchen* (TT) die x -Achse verlassen hat, durchgeführt werden.³²

Rechnungen lassen sich durch die Methode der Rückrotationen typischerweise um das 3-fache beschleunigen.³³

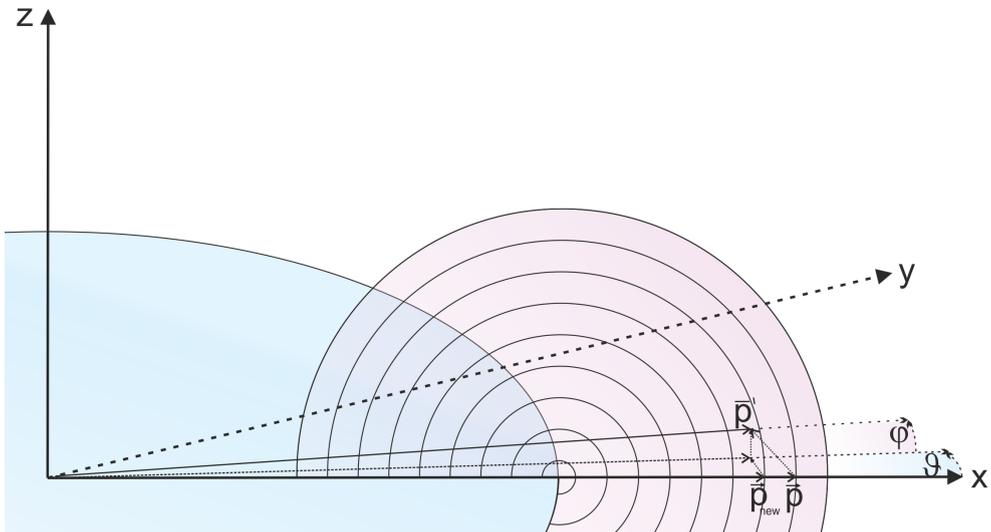


Abbildung 4.2.: Skizze zur Veranschaulichung der Rückrotationswinkel Φ und θ , welche beim Zelldurchgang von \vec{p} nach \vec{p}' überstrichen werden. Nach der Rückrotation wird \vec{p}' durch den Vektor \vec{p}_{new} ersetzt.

³⁰Eine Beschreibung des Algorithmuses zur Zuweisung von Zellnummern befindet sich in Anh. B.4.

³¹CELLSOR bietet die Option dieser Rechenmethode über den *boolschen* Eingabeparameter `vector_back_rotation`.

³²Wendet man die Rotationen gleichzeitig auch auf den Schnittpunktvektor \vec{s} mit der Wandoberfläche an, so wird die Information über den Einfallswinkel erhalten, während das Zuordnen zu Zellen mit Radius ρ_{cell} unverändert bleibt.

³³Die dabei begangenen numerischen Fehler sind vernachlässigbar klein (Anh. B.1).

Die Rotationsmatrizen zur Anwendung auf \vec{p}' , \vec{v} und \vec{S} , sind:

$$R_\theta = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R_\phi = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & 0 & \sin(\phi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\phi) & 0 & \cos(\phi) \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Sowohl der Poloidal- ϕ als auch der Toroidalwinkel θ , die bei einem Zelldurchgang überstrichen werden, lassen sich ermitteln, indem man den Positionsvektor, der die Position des TT nach dem Zelldurchgang beschreibt, in die xy -Ebene projiziert, i.e.

$$\vec{p}_{xy} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Die überstrichenen Winkel ϕ und θ sind:

$$\phi = \cos^{-1} \left(\frac{|p_{xy}|}{|\vec{p}|} \right), \quad \theta = \cos^{-1} \left(\frac{p_x}{|p_{xy}|} \right). \quad (4.17)$$

Zunächst wird der neue Positionsvektor \vec{p}' durch die *Rückrotation* um θ in die xz -Ebene rotiert, i.e. $\vec{p}_{xz} = R_\theta \vec{p}'$. Anschließend wird der so entstandene Positionsvektor \vec{p}_{xz} durch Rotation um Φ auf der x -Achse erzeugt, i.e. $\vec{p}_{new} = R_\phi \vec{p}_{xz} = R_\phi (R_\theta \vec{p}')$ (Abb. 4.2). Analog wird mit \vec{S} und \vec{v} verfahren. Die Referenzachse liegt in x -Richtung und beherbergt den Punkt, auf den der Referenzvektor p_0 zeigt, also

$$\vec{p}_0 = \begin{pmatrix} R \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Die Rotationsmatrizen aus Gl. 4.15 entsprechen Rotationen entgegen dem Uhrzeigersinn. Im Falle von $p_y > 0$, i.e. dem Überschreiten der x -Achse in positiver y -Richtung, wird hingegen im Uhrzeigersinn zurückrotiert, ergo wird R_θ^{-1} verwendet. Selbiges gilt für den Poloidalwinkel, ergo einer Rotation mithilfe von R_ϕ^{-1} , falls die xy -Ebene nach unten verlassen wurde, i.e. bei $p_{xz,z} < 0$.

4.2.2. Wechselwirkungen zwischen Testteilchen und Hintergrundplasma

Die MC-Methode erfordert das *Würfeln nach Chancen* in diskreten Schritten, um über lokale WW'en zwischen dem Testobjekt und seiner Umgebung zu entscheiden.

Im Falle von CELLSOR werden mithilfe von Reaktionsratenkoeffizienten, welche aus der *HYD-HEL*- sowie *AMJUEL*-Datenbank generiert werden,[119, 121] Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen *phys. WW'en*³⁴ ermittelt, welche zwischen dem simulierten TT und dem stationären Plasmahintergrund beim durchqueren einer Zelle auftreten können.³⁵

³⁴Die in CELLSOR berechneten physikalischen Wechselwirkungsprozesse zwischen TT und Plasmahintergrund sind jene der Dissoziation und der Ionisation von Molekülen mit dem Elektronenhintergrund sowie jene der Ionisation von Atomen mit dem Elektronenhintergrund und des Ladungsaustauschs zwischen Atomen und dem Ionenhintergrund.

³⁵Eine Notwendige Bedingung für derartige Simulationen ist, dass die Zellbreite Δ_{cell} und damit die Auflösung, i.e. die Feinheit der Diskretisierung, klein ist gegenüber den mittleren freien Weglängen λ_{mfp} , die sich aufgrund der stationären Plasmabedingungen $n(\rho)$ und $T(\rho)$ für phys. Wechselwirkungsprozesse ergeben.

Für die Wahrscheinlichkeiten von Wechselwirkungsprozessen innerhalb einer Zelle ist die Verweilzeit

$$t_{dwell} = \frac{\Delta_{fly}}{|\vec{v}|} \quad (4.19)$$

entscheidend, welche aufgrund der Flugdistanz Δ_{fly} , i.e. dem Abstand des Schnittpunkts der benachbarten Flussfläche am Ort $\rho \pm \Delta_{cell}$ zum Geschwindigkeitsvektor \vec{v} , errechnet wird.

Die Reaktionswahrscheinlichkeit $0 \leq p \leq 1$ ist eine Funktion des Reaktionsratenkoeffizienten $\langle \sigma v \rangle$:

$$p = 1 - e^{(-t_{dwell} \langle \sigma v \rangle)}. \quad (4.20)$$

Selektion bevorzugter Wechselwirkungsprozesse

Kommt es in einer Zelle zu der Situation, dass N gewürfelte Zufallszahlen $k_1 \dots k_N$ jeweils die Bedingung $k_i \leq p_i$ für $i = 1 \dots N$, i.e. für N potenzielle Reaktionen erfüllen, so wird nochmals zwischen diesen Reaktionen nach Chancen gewürfelt, mit den $j = 1 \dots N$ Wahrscheinlichkeitsgrenzen:

$$p_j = \sum_{k=1}^{j-1} p_k + \frac{p_j}{\sum_{i=1}^N p_i}. \quad (4.21)$$

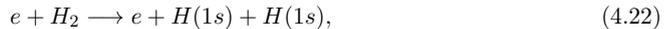
Der erste Summand in Gl. 4.21 sorgt dafür, dass alle Wahrscheinlichkeiten p_j angrenzende Teilintervalle von $[0 \dots 1]$ ergeben. Aus diesen wird anschliessend mit einer weiteren Zufallszahl $0 \leq k \leq 1$, anhand der Bedingung $p_{j-1} \leq k < p_j$, die bevorzugte der N Reaktionen innerhalb der Zelle ermittelt.

Molekül-Plasma-Wechselwirkungen

Für die Molekül-Plasma-Wechselwirkungen, welche für von der metallischen Wandfläche desorbierende Moleküle gelten, werden 6 mögliche Reaktionskanäle unterschieden, aufgeteilt in die WW von

- H_2 -Molekülen mit dem Elektronenhintergrund,
- sowie von ionisierten H_2^+ -Molekülen mit dem Elektronenhintergrund.³⁶

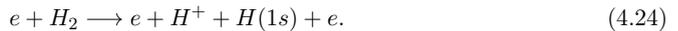
Die Ratenkoeffizienten wurden aus der *HYDHEL*-Datenbank entnommen.[119]
Die berücksichtigten Reaktionen sind die molekulare Dissoziation, i.e.



bei der die beiden Atome nach dem Stoss die *Franck-Gordon-Energie* $E_0 = 3$ eV tragen, sowie die Ionisation in den Zwischenzustand H_2^+ , i.e.

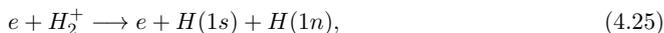


sowie die Dissoziation in ein Ion und ein Atom, i.e.

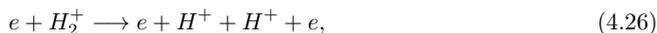


³⁶Das TT kann vom Typ H_2 in den ionisierten Zwischentyp H_2^+ übergehen. Das Weiterverfolgen im Zustand H_2^+ ist durch die anschließende Möglichkeit der Dissoziation in mindestens ein Neutralteilchen H begründet.

Das Atom trägt anschließend eine Energie von $E_0 = 5$ eV (Gl. 4.24). Für TT, welche nach einem Dissoziationsstoß in den Zustand H_2^+ (Gl. 4.23) gewechselt sind, werden Reaktionsraten für die Prozesse der Dissoziation in zwei Atome, i.e.



wobei hier die Rate aus der *AMJUEL*-Datenbank stammt und die beiden Atome als Näherung mit der Energie $E_0 = 0.86T_e$ eV weiterfliegen (also ortsabhängig), sowie der Dissoziation in zwei Ionen, i.e.



sowie der Dissoziation in ein Ion und ein Atom, i.e.



berücksichtigt. Bei letzterer Reaktion (Gl. 4.27) trägt das Atom die Energie $E_0 = 4,3$ eV.

Atom-Plasma-Wechselwirkungen

Befindet sich das TT im Zustand eines Atoms, etwa nach der Dissoziation als zuvor desorbiertes Molekül oder nach der Wandreflexion eines Ions, so werden Ratenkoeffizienten³⁷ für die Reaktionen der Ionisation von Wasserstoff mit einem Elektron, i.e.



und für CX (Kap. 3.2.6) zwischen einem Wasserstoffatom und einem Wasserstoffion des Plasmahintergrunds, i.e.



berücksichtigt.

Für Elektronenstöße gilt in guter Näherung Äquivalenz der Reaktionsraten für Stöße mit Wasserstoff sowie der schwereren Isotope Deuterium und Tritium.³⁸

Isotopenkorrektur der Ladungsaustauschraten

Die CX-Reaktion der *HYDHEL*-Datenbank (Gl. 4.29) beschreibt Stöße zwischen leichten Wasserstoffpartnern.³⁹

Sind die Stoßpartner allerdings schwere Wasserstoffionen wie D und T, so verändert sich die Reaktionskinetik für $T(\rho)$ auf Grund der veränderten Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner im Centre of Mass (CoM)-System.

³⁷Die Reaktionsrate wird im Falle der Ionisation (sowie der Dissoziation bei Molekül-Plasma-Wechselwirkungen) in guter Näherung allein durch Heranziehen der mittleren Temperatur $T(\rho)$ der Hintergrundelektronen am Ort ρ bestimmt. Das Temperaturprofil ist eine Eingabegröße, welche als Plasmabeschreibung beim Start einer CELLSOR-Rechnung notwendig ist. Dadurch lassen sich auch die Ratenkoeffizienten sämtlicher Reaktionen bis auf den CX-Stoß (Gl. 4.29) vorab den diskreten Zellen zuordnen, wodurch hohe Rechengeschwindigkeiten möglich werden. Beim Starten einer MC-Rechnung wird dazu ein verschachteltes `mega_array` in den Speicher geladen, welches für jede Zelle die Plasmadichte, -temperatur sowie obige Ionisations- und Dissoziationsraten, i.e. $n_e(\sigma v)$, enthält. Die Temperatur in Zelle i kann bspw. durch den Aufruf `mega_array[i][0]` zügig aus dem Arbeitsspeicher abgerufen werden.

³⁸Analoges gilt für Stöße der Moleküle H_2 sowie den schwereren Molekülen D_2 und T_2 .

³⁹Die Bewegung der Ionen wird durch die gemittelte Plasmatemperatur $T(\rho)$ beschrieben, und die Bewegung des TT durch seine Masse und Geschw. (kin. Energie).

Bei Rechnungen mit einem D-T-Plasma werden die Reaktionsraten des leichten Wasserstoffs (Gl. 4.29), analog zur Behandlung bei EIRENE, zur Korrektur der Reaktionskinetik, mit um den Faktor 2 (D) bzw. 3 (T) verringerten Energien und Temperaturen ausgewertet.

Kinetik des Ladungsaustauschstoßes

Nach jedem CX-Stoß verändert sich die Geschwindigkeit und Flugrichtung des TT, wodurch sich auch der Aufprallwinkel auf die erste Wand verändert (Gleichungen B.1-B.1).

Die Bestimmung der Komponenten des Geschwindigkeitsvektors nach einer Umladung erfolgt durch die lokale Temperatur $T(\rho)$, unter Vernachlässigung netto existierender, radialer Bewegungskomponenten des Plasmas (radialer Transport / Driften).⁴⁰ Das Hintergrundplasma wird als ruhendes Teilchenensemble behandelt, innerhalb dessen die Geschwindigkeiten einer MBV folgen. Für den *Geschwindigkeitsvektor*⁴¹ \tilde{v} des Neutralteilchens nach dem Stoß gilt in erster Näherung, aufgrund der Isotropie des Stoßprozesses,

$$\tilde{v}_{x,y,z} = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \mathcal{N}(0, 1), \quad (4.30)$$

mit $\tilde{v} = \sqrt{\tilde{v}_x^2 + \tilde{v}_y^2 + \tilde{v}_z^2}$ und $\mathcal{N}(0, 1)$: gaußverteilte Zufallszahl mit $\mu = 0$ und $\sigma = 1$.

Algorithmus nach Cupini *et al.*

Tatsächlich ist der Wirkungsquerschnitt für den CX-Stoß eines Projektils der Geschwindigkeit \vec{v} mit Ionen, deren Geschwindigkeiten sich im Intervall $d\vec{v}$ einer MBV der Temperatur T befinden, jedoch für verschiedene $d\vec{v}$ unterschiedlich.⁴²

Cupini *et al.* publizierten den Algorithmus einer *Verwerfungsmethode* zur Generierung der tatsächlichen Geschwindigkeitsverteilung von Neutralteilchen nach einem CX-Stoß.⁴³[29]

Dabei wird folgendermaßen verfahren:⁴⁴ zunächst wird nach einer Umladung in einer Zelle der Temperatur T , eine Geschwindigkeit \tilde{v} nach Gl. 4.30 aus einer MBV generiert. Anschließend wird der relative Geschwindigkeitsvektor zwischen TT und Hintergrundion gebildet, also $\vec{v}_{rel} = \vec{v} - \tilde{v}$. Für die generierte Relativgeschwindigkeit wird das Produkt aus *Wirkungsquerschnitt*⁴⁵ σ_{CX} und Relativgeschw. v_{rel} gebildet, d.h. die Rate

$$q(v_{rel}) = \sigma_{CX}(v_{rel})v_{rel}. \quad (4.31)$$

⁴⁰Eine weitere Besonderheit des CX-Stoßes ist jene, dass zur Bestimmung des Ratenkoeffizienten neben der Temperatur des Ionenhintergrundes auch die kinetische Energie des TT benötigt wird. Da sich diese im Laufe einer MC-Rechnung bei sämtlichen CX-Stößen verändert, kann der Ratenkoeffizient nicht vorab in den Arbeitsspeicher geladen werden, sondern wird in den Zellen funktional abgerufen.

⁴¹In Kugelkoordinaten erhält man nach Integration über die Winkelkomponenten von \tilde{v} (Gl. 4.30) einen Ausdruck $\propto v^2 \exp -v^2/(2\sigma^2)dv$, i.e. eine MBV für die Länge des Geschwindigkeitsvektors \tilde{v} . [54]

⁴²Dabei kommt es bevorzugt zu Stößen mit Teilchen einer bestimmten Relativgeschw., bezogen auf die Geschwindigkeiten in $d\vec{v}$, während Stöße mit schnelleren oder langsameren Hintergrundionen unterdrückt werden.

⁴³Diese Methode ist allgemein für MC-Simulationen von Neutralteilchen in Plasmen gültig.

⁴⁴Eine Verifizierung der in CELLSOR implementierten *Verwerfungsmethode* wird im Anh. B.5 diskutiert. Dabei wurden von Cupini *et al.* abgebildete Verteilungen für identische Projektil-Plasma-Annahmen reproduziert. [29]

⁴⁵Der Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $p + H(1s) \rightarrow H(1s) + p$ wird über den Fit $\ln(\sigma_{CX}) = \sum_{n=0}^N a_n (\ln(E))^n$ aus den tabellarisch von Reiter publizierten Koeffizienten a_n anhand der Relativgeschwindigkeit v_{rel} ermittelt und für schwere Wasserstoffisotope bei der korrigierten Energie $\tilde{E} = E/2$ (D) bzw. $\tilde{E} = E/3$ (T) ausgewertet. [119]

Aus dieser Rate (Gl. 4.31) wird anschließend für sämtliche erlaubte Relativgeschwindigkeiten v_{rel} das Maximum $G = \max q(v_{rel})$ gebildet.⁴⁶

Die über Gl. 4.30 generierte Geschw. v' wird anschließend akzeptiert, falls eine Zufallszahl c , welche gleichförmig aus dem Intervall $(0,1)$ generiert wird, die Bedingung

$$c < q/G \quad (4.32)$$

erfüllt, und andernfalls verworfen. In Verwerfungsfall wird eine neue Geschw. \tilde{v} generiert, für die die Prozedur wiederholt wird.⁴⁷

Nach Gl. 4.30 - 4.32 gewürfelte Geschwindigkeiten werden abschließend noch nach unten hin beschränkt,⁴⁸ sodass für die resultierende kin. Energie gilt: $E_{kin} \geq 0,1 \text{ eV}$, also $\tilde{v}_{min} = \sqrt{\frac{0,2 \cdot q}{m}}$.

4.2.3. Gewichtung von Testteilchen

Analog zur Behandlung bei EIRENE werden Teilchen mit einem Gewichtungsfaktor w_i versehen, welcher bei Zählprozessen die Teilchenzahlerhaltung einer CELLSOR-Rechnung wahrt. Initial auf die Wand prasselnde Wasserstoffionen tragen die Gewichtung $w_i = 1$, ebenso wie reflektierte atomare TT i . Diese können ihren Zustand j und die Gewichtung $w_i(j)$ zwischen Molekül und Atom

- nach Wandaufprall, i.e. ein DT-/D₂-/T₂-Molekül startet von der Wand desorbierend: $w_i \longrightarrow 0,5w_i$,
- nach der Dissoziation, i.e. ein DT-/D₂-/T₂-Molekül dissoziiert in zwei Atome (Gl. 4.25 und 4.22):⁴⁹ $w_i \longrightarrow 2w_i$,

wecheln. Dabei verändert sich das Gewicht w_i (und zudem auch die Masse m_i) eines TT i beim Zustandswechsel (s.o.).

4.2.4. Konstruktion der Testteilchenquelle

Die Testteilchenquelle wird entweder

- aus reflektierten Atomen (D, T) / desorbierenden Molekülen (DT-/D₂-/T₂) des Wandrecyclings
- oder aus injizierten gefrorenen Pellets / eingeblasenen Gasatomen der externen Brennstoffzufuhr

gebildet.

⁴⁶Das Maximum G liegt für einen D-D-Stoß bei $E_{rel} \approx 8,5 \text{ keV}$, entsprechend $q_{max} = 1,25 \cdot 10^{-15} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$.

⁴⁷Am Ende einer CELLSOR-Rechnung wird die mittlere Anzahl der benötigten Verwerfungen ausgegeben. Diese dient als Maß für die Güte der *Verwerfungsmethode*.

⁴⁸Die Beschränkung wird vorgenommen, da der Gültigkeitsbereich für den doppelt polynomiellen Fit der CX-Ratenkoeffizienten (Reaktion 3.1.8. aus HYDHEL[119]) unterhalb von $E = 0,1 \text{ eV}$ verlassen würde.

⁴⁹Dabei wird das bisherige TT zufällig durch eines der beiden dissoziierten Atome mit doppeltem Zählgewicht w_i ersetzt. Bei der Dissoziation in ein Atom und ein Ion (Gl. 4.24 und 4.27) behält das TT den Gewichtungsfaktor des Moleküls bzw. Molekülions.

Wandrecycling

Im Falle des Wandrecyclings wird die Quellstärke der CELLSOR-Rechnung durch den Recyclingfluss Γ_{rec} bestimmt. Dieser setzt sich aus reflektierten Atomen und desorbierenden Molekülen zusammen.

Dazu werden Annahmen über die Energien der ursprünglich aufprasselnden Wasserstoffionen, sowie der Zustands- und Energieverteilung der recycleten TT gemacht.⁵⁰

Die mittlere Aufprallenergie E_{DT}^+ der D-T-Ionen wird anhand der wandseitigen Plasmatemperatur (T_e, T_i ; beim Eintritt in die Schicht) durch das vereinfachte Schichtpotenzial zu

$$E_{DT}^+ \approx 2T_i + 3T_e \quad (4.33)$$

approximiert, unter der Annahme von normalem Aufprallwinkel.⁵¹

Geschwindigkeitsverteilung

Ein TT startet entweder als reflektiertes Atom, oder als desorbierendes Molekül. Das Verhältnis entspricht dem Verhältnis von Reflektion zu Adsorption, welches für die initial auf die Wand fliegenden Ionen vorherrscht.

CELLSOR verwendet - analog zu EIRENE - zur Berechnung den energie- und winkelabhängigen *Teilchenreflektionskoeffizienten* $p_r(E, \theta)$, jeweils für D und T, mit Daten aus [35]; logischerweise beschreibt $(1 - p_r)$ den Anteil an adsorbierten Teilchen.

Reflektierte bzw. desorbierende Teilchen starten mit unterschiedlichen Energien / Geschwindigkeiten. Zur Berechnung der mittleren Energie der reflektierten TT verwendet CELLSOR den *Energierreflektionskoeffizienten* $E_r(E, \theta)$, gebildet aus Eckstein-Daten.[35]

Moleküle desorbieren thermalisiert auf Wandtemperatur T_{wall} (typischerweise $\approx 800\text{K}$) als DT-, D₂- oder T₂-Moleküle, mit den entsprechenden relativen Häufigkeiten von 0,5, 0,25 bzw. 0,25. Diese starten mit einer approximierten $\cos(\theta)$ -Winkelverteilung. Die radiale Komponente der Moleküle wird durch Projektion auf die x -Achse zu

$$v_x = -\sqrt{[0\dots 1]} \cdot 2\sqrt{\frac{k_B T_{wall}}{m}} \quad (4.34)$$

berechnet, mit $[0\dots 1]$: zufällige Fließkommazahl mit $0 \leq number \leq 1$ und k_B : Boltzmann-Konstante. Die mittlere Energie der desorbierenden Moleküle beträgt im thermischen Gleichgewicht $\langle E \rangle = 2k_B T_{wall}$ (Gesetz von Boltzmann). Die Desorption erfolgt mit einer $\cos(\theta)$ -Winkelverteilung (Gesetz von Knudsen).⁵²

⁵⁰Die TT-Quelle wird anhand dieser Annahmen mithilfe der Gesetze für Teilchen- (Kap. 4.2.4) und Energieerhaltung konstruiert. Die Stärke des initial aufprallenden Ionenstrahls, also der radiale Teilchenfluss, muss nicht notwendigerweise vor der MC-Rechnung bekannt sein, da sich die Ergebnisse eines gerechneten Ensembles post-mortem linear mit dem Teilchenfluss skalieren lassen.

⁵¹Normal bezieht sich in diesem Fall auf den Winkel relativ zum Normalenvektor der Wandoberfläche. Normal bedeutet also $\theta = 0^\circ$.

⁵²Experimentell wurden bei der Desorption von Wasserstoffmolekülen von metallischen Oberflächen - je nach Substrat - geringfügig höhere Energien bis zu $\langle E \rangle = 3k_B T_{wall}$ beobachtet, sowie deutlich *gepeakte* Winkelverteilungen, etwa $\propto \cos^3(\theta)$. [8, 38] Aufgrund der Substratabhängigkeit des Desorptionsprozesses wurde mit obigem Ansatz (Gl. 4.41, Gesetz von Boltzmann und Knudsen) eine allgemeingültige Beschreibung für die Energie- und Winkelverteilung desorbierender Moleküle gewählt.

Reflektierte Atome starten mit der projizierten Geschwindigkeitskomponente

$$v_x = -\sqrt{\frac{2E_{DT}^+ E_r q}{m}}, \quad (4.35)$$

mit $E_{DT}^+ = V_{sh}$ und Teilchenmasse m . Die verschiedenen Teilchenspezies, die aufgrund ihrer Masse unterschieden werden, sind D₂, DT, T₂, D, T.

Testteilchenquelle bei externer Brennstoffzufuhr

Neben der Schädigung durch umgeladene recycelte D-T-Neutralteilchen erlaubt CELLSOR die Abschätzung der Zerstäubung aufgrund des in die Brennkammer geführten Brennstoffs, sei es durch Gaseinlass oder Injektion gefrorener Pelletkugeln.

Modell der Ablation injizierter gefrorener Pellets

Injizierte Brennstoffpellets starten mit der Frequenz ν_{pel} auf Höhe der oberen Mittelebene und fliegen mit der Geschwindigkeit v_{pel} senkrecht zur Wandoberfläche in die Brennkammer.

Beim Eintritt in ein Plasma beginnt ein kugelförmiges Pellet aufgrund von Reibung und Stößen mit vorwiegend hochenergetischen Plasmateilchen, sich vom Rand bis zum Kern zu erhitzen. Dabei kommt es zur Ablation von Randmolekülen.

Die Ablationsrate wurde von Cseh *et al.* in Abhängigkeit der lokalen Plasmaparameter n_e und T_e durch ein semi-empirisches Skalierungsgesetz beschrieben:⁵³[27]

$$\dot{N} = 1.12 \cdot 10^{16} r_p^{4/3} n_e^{1/3} T_e^{1.64} M_i^{-1/3}. \quad (4.36)$$

Mithilfe von Gl. 4.36 wird in jeder Zelle die mittlere Ablationszahl N_{abl} bestimmt. Dazu wird die Kenntnis des *lokalen Radius*⁵⁴ r_p des Pellets sowie seiner Geschw. v_{pel} und Aufenthaltsdauer t_{dwell} in der MC-Zelle benötigt.

Die Startgröße eines wandseitig injizierten Pellets wird über die vorgegebene Fusionsleistung P_{Fus} des Kernplasmas abgeschätzt, da die dortige Ionenquelle aus ablatiertem und ionisiertem Brennstoff besteht. Im Falle stationärer Verhältnisse lässt sich die Rate Φ_{DT} , mit der Ionen im Kernplasma geboren werden, über die dortige Heliumkonzentration c_{He} und die Heliumentstehungsrate, i.e.

$$\Phi_{He} \approx \frac{P_{Fus}}{E_{DT}}, \quad (4.37)$$

mit P_{Fus} : Fusionsleistung in W, $E_{DT} = 2,82 \cdot 10^{-12}$ J: Energie, die bei einer Kernfusionsreaktion zwischen D und T freigesetzt wird, abschätzen zu:

$$\Phi_{DT} \approx c_{He}^{-1} \Phi_{He}. \quad (4.38)$$

⁵³Dieses basiert auf einem von Garzotti *et al.* aufgestellten Skalierungsgesetz für die Pellet-Ablation in *Maxwell'schen Plasmen*. [49]

⁵⁴Der lokale Pelletradius $r_{p,i}$ in einer Zelle i wird über ein Kugelmodell, durch Subtraktion der Ablationsverluste innerhalb der vorherigen Zellen, von der Ursprungsgröße r_{pel} - analog zu Gl. 4.40 - ermittelt, i.e. mit $N_{DT} \rightarrow N_{DT} - \sum_i N_{abl,i}$.

Die Teilchenzahl N_{DT} im Pellet wird aus dem Quotient der Schussfrequenz ν_{pel} der Kanone sowie des erweiterten Quellflusses ermittelt zu

$$N_{DT} = 1.05 \cdot \frac{\Phi_{DT}}{\nu_{pel}}. \quad (4.39)$$

Zur Kompensation der Verluste ($\leq 5\%$) im SOL wurde Γ_{DT} mit dem Faktor 1,05 (Gl. 4.39) multipliziert.⁵⁵

Der *initiale Pelletradius*⁵⁶ (in cm) vor der Ablation wird für eine Kugel mithilfe des mittleren molaren Volumens von festem D, i.e. $V_{mol}^{D_2} \approx 19,95$ cc/mol,[132] abgeschätzt zu

$$r_{pel} = \left(19,95 \cdot \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{N_{DT}}{6,022 \cdot 10^{23}} \right)^{1/3}. \quad (4.40)$$

Das Ablationsprofil wird zunächst berechnet und dann als normierte Gewichtungsliste an eine Methode übergeben, die zur Ermittlung der Startposition eines ablatierten TT, entsprechend der Wahrscheinlichkeitsverteilung, die Startposition im Plasma auswürfelt.⁵⁷

Ablatierte Moleküle (D_2 , T_2 , DT) starten in der anschließenden MC-Rechnung in der entsprechenden Zelle, mit der zum Plasmazentrum gerichteten Pelletgeschw. v_{pel} .⁵⁸

Modell der Gaszufuhr

Im Falle der Brennstoffzufuhr durch Gaseinlass starten die TT - analog zum Wandrecycling - als D_2 -, T_2 - oder DT -Moleküle mit den relativen Wahrscheinlichkeiten 0,25 / 0,25 / 0,5 und einem Teilchengewicht $w_i = 0,5$ sowie einer $\cos\theta$ -Winkelverteilung.

Die thermische Startgeschwindigkeit v wird durch die mittlere Tempertur T_{gv} des Gasventils vorgegeben. Die Projektion auf die x -Achse ergibt

$$v_x = -\sqrt{4 \cdot [0..1]} \cdot \sqrt{\frac{k_B T_{gv}}{m}}, \quad (4.41)$$

mit $[0..1]$: zufällige Fließkommazahl mit $0 \leq number \leq 1$.

Anders als beim Pellet-Modell, bei dem typischerweise mehr als 98 Prozent der Ablation innerhalb der Separatrix stattfindet, muss bei der Gaszufuhr gesondert berechnet werden wie stark der benötigte Quellfluss an der Wand, d.h. am Gaseinlass, sein muss, damit im Hauptplasma die geforderte Fusionsleistung P_{Fus} erreicht wird, welche eine bestimmte stationäre Helium-Konzentration c_{He} zur Folge hat.⁵⁹

⁵⁵Beim Durchqueren des SOL werden stets weniger als 5% der injizierten Pelletmoleküle ablatiert; gerechnet nach Daten des AUG-Systems von Lang *et al.*: $\nu_{pel} = 20$ Hz und $v_{pel} = 1000$ m/s.[89, 90, 91]

⁵⁶Für $P_{Fus} = 2$ GW sowie $c_{He} = 0,01$ folgt nach Gl. 4.38 $N_{DT} = 3,72 \cdot 10^{21} \text{ s}^{-1}$, ergo nach Gl. 4.40 ein typischer Pelletradius von $r_{pel} \approx 3$ mm.

⁵⁷Abb. B.3 zeigt das nach Gl. 4.36 - 4.40 berechnete Ablationsprofil für ein D-T-Brennstoffpellet, welches mit 20 Hz und 1000 m/s in einen DEMO-Reaktor mit $a = 2,643$ m, $\Delta_{SOL} = 0,13$ m und $P_{Fus} = 2,5$ GW (bei $c_{He} = 0,05$) injiziert wurde.

⁵⁸Die Stoßkinetik wird dabei in erster Näherung ignoriert, da es im Zuge der Ablation im Mittel zum Impulsübertrag entlang der magnetischen Feldlinien kommt, wodurch das Pellet in radialer Richtung keine Nettoabbremsung erfährt.

⁵⁹Die Bestimmung des notwendigen externen Teilchenflusses am Ende des Gasventils auf Höhe der ersten Wand wird in Kap. 4.6 diskutiert. Entscheidende Parameter sind dabei die SOL-Breite Δ_{SOL} sowie die mittlere freie Weglänge $\lambda_{mfp,iz}$ für Ionisationsstöße, welche durch die Elektronentemperatur des Plasmahintergrundes bestimmt wird.

Dissoziation

Im Falle der Desorption als DT-, D₂- oder T₂-Molekül werden zunächst ausschließlich die Reaktionen der Gleichungen 4.22 - 4.27 zugelassen. Kommt es beim Durchqueren einer Zelle zur Dissoziation, so wird das molekulare TT durch ein Atom mit neuen Geschwindigkeitskomponenten ersetzt.⁶⁰

Diese entsprechen der *Franck-Condon Energie*, i.e. $E_{FC} = 3 - 5$ eV, welche für die jeweiligen Übergänge verschieden ist.

Da der Prozess isotrop im *CoM*-System ist, werden zwei Zufallswinkel ϕ_1 und ϕ_2 , analog zu den Winkeln θ und ϕ von Kugelkoordinaten, ausgewürfelt. Für den Geschwindigkeitsvektor v_{CoM} im *CoM*-System folgt daher durch Addition der Geschwindigkeitskomponenten des Moleküls beim Dissoziationsstoß:

$$\vec{v}_{CoM} = \begin{pmatrix} (a + v_x) \sin \phi_1 \cos(\phi_2) \\ (a + v_y) \sin \phi_1 \sin(\phi_2) \\ (a + v_z) \cos(\phi_1) \end{pmatrix}, \quad \text{with } a = \sqrt{\frac{2E_{FC}q}{m}}. \quad (4.42)$$

Zur Rückführung ins Laborsystem wird der Geschwindigkeitsvektor auf die entsprechende *Franck-Condon Energie* reskaliert, sodass die Winkelisotropie im *CoM*-System erhalten bleibt; dies geschieht durch eine Multiplikation des Geschwindigkeitsvektors \vec{v} mit dem Skalar $a/|\vec{v}_{CoM}|$. Aufgrund der Richtungsänderung wird zudem ein neuer Wandreflektionsvektor \vec{v}_{refl} nach Gl. B.1 erzeugt.

4.2.5. Neutralteilchendichte

Das zuvor eingeführte Teilchengewicht w_i ist als Zählgewicht relativ zur Ionenquelle bzw. zum Recyclingfluss zu verstehen. Beim Passieren einer Zelle wird für jedes TT ein Zählvorgang anhand seiner Gewichtung vorgenommen. Der simpelste Zählvorgang *misst*⁶¹ schlicht die Häufigkeit eines Passiervorgangs durch eine Zelle am Ort ρ . Die Zählung der Zelldurchgänge kann in die physikalische Information der Wasserstoff- Neutralteilchendichte $n_n(\rho)$ übersetzt werden, durch

$$n(\rho) = \frac{f_{rec}}{N} \sum_i \frac{w_i t_{dwell,i}}{V_{cell,i}}, \quad (4.43)$$

mit Φ_{rec} : Flächenflussdichte des Wandrecyclings, i : Nummer des gezählten TT am Ort ρ , $N = \sum_i w_i$: gewichtete Teilchensumme. Die Quellfrequenz in Hertz, i.e.

$$f_{rec} = \Phi_{rec} A_{wall}, \quad (4.44)$$

entspricht für von der Wand startende TT der Flächenflussdichte Φ_{rec} multipliziert mit der Wandoberfläche $A_{wall} = 4\pi^2 \rho_{wall} R$. Das Volumen einer Zelle der Breite Δ_{cell} am Ort ρ_i ist gegeben durch

$$V_{cell,i} = 4\pi^2 \rho_i R \Delta_{cell}. \quad (4.45)$$

⁶⁰Im Falle der Dissoziation eines Moleküls in zwei Atome ändert das TT seinen Typ von Molekül zu Atom. Damit die Teilchenzahlerhaltung dabei nicht verletzt wird, wird ferner mit doppelter Gewichtung gezählt. Beide Atome, entstanden durch Dissoziation, verlassen den Ort der Entstehung in entgegengesetzte Richtungen. Der bei der Verfolgung eines Teilchens mit doppelter Gewichtung begangene Fehler verschwindet für einige hundert simulierte Dissoziationsprozesse näherungsweise, aufgrund der Isotropie des Prozesses.

⁶¹Dabei wird nach jedem Passieren eines TT ein Zählgewicht w_i in der entsprechenden Zelle addiert, im Quellcode durch `cell_array[cellnumber] += weight_factor`.

4.2.6. Zerstäubungsausbeuten

Zuvor wurde erklärt wie mit CELLSOR die radiale Dichteverteilung der neutralen Wasserstoffteilchen *gemessen* werden kann. Diese ist bedeutsam zur konsistenten Berechnung des initialen Ionenflusses, der auf die Wand strömt, da in der dazu zu lösenden Kontinuitätsgleichung die Ionisation von Neutralteilchen im volumetrischen Quellterm auftaucht.

Ist der Fluss auf die Wand bzw. die Quellstärke bekannt, so hängt die Schädigung im Wesentlichen von der Zerstäubungsrate ab, da diese angibt, welcher Anteil des auf die Wand treffenden Wasserstoff-Ionenflusses zur Erosion führt.

CELLSOR betrachtet die erste Wand im Hauptraum der Brennkammer als eine plasmaseitig glatte, homogene und wenige Millimeter dicke Wolframschicht.⁶²

Für neutrale D-/T-Atome, die auf eine Wolfram-Wand treffen, wird $Y_i(\gamma, E)$ durch lineare Interpolationen der Tabellendaten von Eckstein gebildet [35].⁶³

4.2.7. Statistik

CELLSOR rechnet die Erosion einer Wolframwand im Hauptraum eines beliebig großen Reaktors in vereinfachter Form, i.e. in einer global gemittelten Gleichgewichtsbetrachtung.⁶⁴

Eine der Stärken der MC-Methode ist die Möglichkeit Fehlerabschätzungen während der Rechnungen zu erheben.⁶⁵ Dabei kann die statistische Varianz einer Größe, die im Zuge einer einzelnen MC-Rechnung berechnet wird, im Vergleich mit derselben Größe aus beliebig vielen weiteren Rechnungen unter Äquivalenten Bedingungen, innerhalb eines Konfidenzintervalls ermittelt werden.

Zur Optimierung der Rechenzeit wird die verfügbare Rechenkapazität auf das minimal notwendige Ensemble von simulierten TT beschränkt; dieses genügt um einen vorgegebenen, statistischen Höchstfehler, gerade so zu unterschreiten. Unter der Vorgabe von Δ_Y (in Prozent) werden genügend TT simuliert, dass das gerechnete Ensemble zur Varianz der mittleren ZA von

$$\sigma_{min}^2(Y_{CX}) \leq \Delta_Y \quad (4.46)$$

führt (Formeln 3.28 und 3.29 in [120]).

4.2.8. Neutralen-Abschirmung

Im Kap. Grundlagen (Kap. 3 Gl. 3.15) wurde der Begriff der *Neutralen-Abschirmung* über *mittlere freie Weglängen* λ_{mfp} für Stoßprozesse (Ionisation, Ladungsaustausch) eingeführt. Die *Neutralen-Abschirmung* Scr sowie -Reabschirmung Scr_b wird von CELLSOR während der Simulation berechnet.

⁶²Das tatsächliche Reaktor-Blanket an DEMO1 besteht nach Bolt *et al.* aus einer wenige mm dünnen protektiven Wolframschicht,[12] welche mit einem graduellen Übergang das Strukturmaterial bedeckt, typischerweise ein niedrig-aktivierender Stahl wie *EUROFER-97*. [159, 150]

⁶³Dabei wird zwischen Deuterium und Tritium unterschieden, sowie in zwei Dimensionen interpoliert, i.e. bei der Projektilenergie sowie beim Einfallswinkel. Die kinetische Energie, i.e. $E_{kin} = 0.5mv^2$, folgt aus der Masse m des TT und der Länge des assoziierten Geschwindigkeitsvektors \vec{v} . Der Einfallswinkel ist zudem bekannt (Gl. 4.17).

⁶⁴Ambitionierte und etablierte Codes wie EMC-EIRENE können solche Rechnungen bereits durchführen. Der Bedarf für einen Code wie CELLSOR ergibt sich aus der Rechenzeitanforderung, d.h. der Priorisierung von Rechenzeit gegenüber Detailgrad, insbesondere im Zuge von integrierten Systemstudien für ein DEMO-Kraftwerk.

⁶⁵Mit jedem simulierten TT, welches im Laufe seiner Lebensdauer auf die Wand trifft und ggf. im Plasma zuvor umgeladen wurde, wächst die Statistik und damit die Güte der Energie- und Winkelverteilung beim Wandaufprall.

Dazu wird über die N simulierten TT (i) und die \tilde{N} bis zu einem Stoßprozess passierten Zellen (j) summiert, i.e.

$$Scr = \sum_{i=1}^N Scr_i (\bar{\lambda}_{mfp,i}), \quad (4.47)$$

mit (analog für CX / iz)

$$\bar{\lambda}_{mfp,i} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{\tilde{N}} \Delta_{cell,j}} \sum_{j=1}^{\tilde{N}} \frac{v_j}{n_j \langle \sigma v_j \rangle (n_j, T_j)}, \quad (4.48)$$

wobei ρ_j die Position der j -ten MC-Zelle der Breite $\Delta_{cell,j}$ angibt und n_j bzw. T_j die mittlere Dichte bzw. Temperatur innerhalb der Zelle.

Reabschirmung

Zur Bestimmung der Reabschirmung Scr_b identifiziert CELLSOR TT, welche durch CX-Stöße im heißen Randschicht-Pedestal geboren wurden und wertet Gl. 4.48 anschließend für diejenigen Teilchen aus, welche aus dem Pedestal zurück in Richtung der ersten Wand fliegen.

4.2.9. Zusammenfassung

Zum besseren Verständnis der Funktionalität von *CELLSOR ERO* (Beschreibung in Kap. 4.4) folgt an dieser Stelle eine Kurzzusammenfassung der Funktionalitäten des CELLSOR-Codes:

1. CELLSOR startet mit Annahmen über auf die Wand prasselnde Brennstoffionen, deren Fluss und mittlere Energie beim Aufprall die TT-Quelle der MC-Rechnung definieren. Der Fluss bestimmt die Quellstärke, d.h. den Faktor, um den die im Ensemble gerechneten Ergebnisse skaliert werden, und die Energie erzeugt die Geschwindigkeitsverteilung der von der Wand startenden TT.
2. Testteilchen (TT) sind in CELLSOR entweder
 - im Falle des Wandrecyclings: reflektierte D- bzw. T-Atome oder desorbierende DT-, D₂- oder T₂-Moleküle, deren relative Anteile durch die mittlere Energie der zuvor aufprallenden Ionen abgeschätzt werden.
 - oder im Falle der externen Brennstoffzufuhr: wandseitig startende gefrorene Kugelpellets (D,T) oder neutrale Gasatome (D,T).
3. TT werden im Laufe einer CELLSOR-Rechnung jeweils bis zur Ionisation verfolgt.
4. Im Laufe einer TT-Historie kann es aufgrund der Wechselwirkungen mit dem Plasma unter Anderem zu CX-Stößen und zum Wandaufprall kommen. Da die Rechengemetrie erlaubt neben der Projektilenergie auch die Winkel beim Wandaufprall zu berechnen, wird eine mit jedem simulierten TT anwachsende Statistik der Energie- und Winkelverteilung sowie der mittleren ZA beim Wandaufprall aufgebaut.
5. Die radiale Dichteverteilung des Brennstoffs (D, T) wird ermittelt; diese erlaubt, die Teilchenbilanz im Anschluss an eine CELLSOR-Rechnung mit volumetrischem Quellterm zu lösen (Gl. 4.71, Kap. 4.5).

6. CELLSOR errechnet den auf die Quellstärke bezogenen Anteil der Wolframotope der ersten Wand im Hauptraum, der durch auftreffende Brennstoff-Neutralteilchen, welche nach CX-Stößen im Pedestal hohe Energien besitzen, erodiert wird.

4.3. Schädigung durch Ionen

Zuvor (Kap. 4.2) wurde beschrieben wie die Schädigung der ersten Wand durch vorwiegend umgeladene Neutralteilchen mit Hilfe des MC-Codes CELLSOR berechnet wird.

Neben der Schädigung durch Brennstoff-Neutralteilchen, i.e. durch im Pedestal freigesetzte Deuterium- und Tritiumatome, geschieht die Erosion einer schwermetallischen Wand durch physikalische Zerstäubung durch aufprallende Ionen.⁶⁶

Ein Plasma, welches möglichst rein aus Brennstoff (D, T) besteht, wird durch das beim Fusionsprozess erzeugte Helium (He) verunreinigt.⁶⁷

Das Strahlungsverhalten in verschiedenen Plasmabereichen wird zur verbesserten Leistungsabfuhr durch gezielten (Edel-)Gaseinlass angeregt. Zum Schutz des Divertors wurde am *Joint European Torus* (JET) Stickstoff (N) ins Divertorplasma eingebracht.⁶⁸ Weitere Kandidaten für DEMO1 sind die schwereren Edelgase Neon (Ne), Argon (Ar), Krypton (Kr) und Xenon (Xe).⁶⁹ Weitere Verunreinigungen bei DEMO1-relevanten Wandkonzepten sind Wolfram (W) und Eisen (Fe). Diese gelangen durch Erosion der zu schützenden ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer ins Plasma.

Dabei führt nicht notwendigerweise die schwerste Verunreinigung zum größten Wandschaden, denn:

- die maximal tolerierbare effektive Verunreinigungskonzentration c_i einer Spezies i wächst $\propto Z_i^{-2}$,
- das Potenzial der Beschleunigung in der wandnahen Debye-Schicht wächst $\propto Z_i$,
- der Energieübertrag beim Wandaufprall wächst mit der Wurzel der Massendifferenz zwischen Projektil und Wandatom, i.e. $\propto \sqrt{m_W - m_i}$.

4.3.1. Beschleunigung im elektrischen Feld der Debye-Schicht

Ionen werden in der wandnahen Debye-Schicht durch das Schichtpotenzial V_{sh} proportional zur getragenen Ladung Z in Richtung der ersten Wand beschleunigt, nach Stangeby gemäß [133]

$$V_{sh} = 2T_i + 3ZT_e. \quad (4.49)$$

⁶⁶Dabei gilt, dass schwere Verunreinigungen aufgrund ihrer zur Wand ähnlicheren Masse einen höheren Impulsübertrag beim Aufprall besitzen, jedoch typischerweise in niedrigeren Konzentrationen das Plasma verunreinigen. Weiterhin werden Verunreinigungen proportional zu ihrem Ionisationsgrad in der Debye Schicht beschleunigt.

⁶⁷Die maximal tolerierbare Verdünnung durch Helium beträgt nach Reiter *et al.* 5 – 10 %. Bei höheren Konzentrationen kann es zur Verletzung der Brennbedingung im Kernplasma kommen.[123]

⁶⁸Die Methode, *impurity seeding* genannt, entlastet die sog. *strike points* auf den Targetplatten des Divertors. Durch die volumetrische Linienabstrahlung des angeregten Stickstoffs können die dort auftreffenden Spitzenwerte der Leistungsflussdichten deutlich (auf einige MW/m²) reduziert werden. Spitzenwerte der im Divertor abgestrahlten Leistung liegen bei JET bei Anteilen von etwa 75 – 80 %; an ASDEX Upgrade (AUG) wurden mit *detached* Divertor sogar 90 % der Leistung abgestrahlt.[9]

⁶⁹Bei CELLSOR-Studien wird jeweils eines dieser *seeding Gase* als Verunreinigung vorgegeben. Dabei gilt, dass die tolerierbare Maximalkonzentration durch den effektiven Verunreinigungsgrad Z_{eff} beschränkt wird.

Betrachtet man die Ionen als Projektil, welche auf die Wand geschossen werden, so wird ihre Energie beim Aufprall in grober Näherung durch die Temperatur der Elektronen (T_e) und Ionen (T_i) im wandnahen Plasma bestimmt.

Anders als bei den umgeladenen Neutralteilchen, welche ihre Energie aus dem heißen *Pedestal* beziehen, ist für die Ionen also die Temperatur im äußeren Bereich des SOL entscheidend.⁷¹

Einfallswinkel beim Wandaufprall

In CELLSOR wird der mittlere Einfallswinkel θ_i von Ionen beim Wandaufprall vorgegeben. Der Winkel $\theta_i = 0^\circ$ entspricht normalem Einfall.⁷²

4.3.2. Ionisationsgrad und Konzentration verschiedener Ionensorten

Die Beschleunigung aufgrund des Schichtpotenzials (Gl. 4.49) und damit die kin. Energie beim Wandaufprall ist proportional zur mittleren Ladung Z der Ionen. Die Anzahl schädigender Ionen wird durch den Fluss, i.e. für eine Spezies i durch das Produkt aus Konzentration c_i und Ionenfluss Γ^+ bestimmt.

Unter der Annahme, dass Verunreinigungen ähnlichem Transport senkrecht zu den magnetischen Feldlinien unterliegen wie Brennstoffionen, werden die erlaubten Konzentrationen aus dem eingeschlossenen Kernplasma nach Hollmann *et al.* in die Zone vor der ersten Wand übertragen.⁷³[63] Für jede Ionenspezies wurde im Modell die Konzentration und der mittlere Ionisationsgrad beim Eintritt in die Schicht aus den Plasmaprofilen abgeleitet.

Der mittlere Ionisationsgrad c_i wurde dabei durch einen Fit an Daten aus dem *FLYCHK*-Code abgeschätzt.⁷⁴ *FLYCHK* von Chang *et al.* basiert auf einem *Stoß-Strahlungs-Modell* zur Berechnung der Verteilung von Ladungszuständen von Ionen in einem Plasma im *nicht-lokalen thermodynamischen Gleichgewicht* (NLTE).[85, 23] Tab. 4.1 zeigt die mittleren angenommenen

Tabelle 4.1.: Mittlerer Ladungszustand Z_i sowie Verunreinigungskonzentration c_i im äußeren SOL für die im CELLSOR-Plasma enthaltenen Verunreinigungen.

Ion	mittlere Ladung Z_i	Konzentration c_i
He	2	0.1
N	7	$0.01 \cdot \delta_{div}$
W	60	$2 \cdot 10^{-5}$

⁷⁰Ionen werden im Hauptplasma für eine endliche Zeit τ_p eingeschlossen. Gelangen diese durch Diffusion und Konvektion senkrecht zu den magnetischen Feldlinien in den SOL, d.h. in den Bereich außerhalb der Separatrix, so werden sie entlang der offenen magnetischen Feldlinien in den Divertor abgeführt und zum Teil - je nach Stärke der nach außen gerichteten Diffusion bzw. Konvektion - senkrecht zu den magn. Feldlinien zur Wand befördert. Plasmen sind quasineutral, d.h. el. abgeschirmt ab Skalen oberhalb der Debye-Länge λ_D . Direkt vor der Wand jedoch entsteht aufgrund der höheren Mobilität der Elektronen gegenüber den Ionen eine Raumladungszone, genannt *Debye-Schicht*, indem sich die Wand negativ gegen das Plasma auflädt; Kap. 3.2.2.

⁷¹Das *Pedestal* ist eine Begleiterscheinung des verbesserten Energieeinschlusses im Plasmazentrum, genannt *H-Mode*; Kap. 3.2.8. Typischerweise beträgt die Elektronentemperatur im Pedestal mehrere keV, während das Plasma des äußeren SOL auf einige eV abgekühlt ist.

⁷²In Kap. 3.4.2 werden die Einfallswinkel von Ionen beim Wandaufprall diskutiert. Bei grossen Tokamaks wie WEST und ITER ergeben sich Einfallswinkel von ca. $20^\circ - 30^\circ$ (Abb. 3.12). Da sich die Verhältnisse aufgrund der höheren Magnetfeldstärken und Plasmatemperaturen nicht vollständig auf DEMO übertragen lassen, wird im konservativsten aller Fälle bei CELLSOR mit normalem Einfallswinkel gerechnet.

⁷³Die maximalen Verunreinigungskonzentrationen im Kernplasma sind anhand der Brennkurven im Plasmazentrum durch deren Strahlungsprofile vorgegeben.

⁷⁴Für eine beschleunigte Rechnung kann alternativ ein Referenzsatz der Parameter c_i und Z_i geladen werden.

Ladungszustände sowie die Konzentration der Ionen beim Schichteintritt. Für Stickstoff wird die mittlere globale Konzentration durch Multiplikation mit δ_{div} ermittelt, wobei $\delta_{div} \approx 0.125$ eine grobe Schätzung für das Oberflächenverhältnis von Divertor- zu Hauptraumplasma darstellt.

4.3.3. Wandzufluss der Brennstoff- und Verunreinigungionen

Der initial auf die Wand strömende Ionenfluss wird mit Γ^+ bezeichnet. Den Großteil daran machen Brennstoffionen aus, i.e.

$$\Gamma_{DT}^+ = f_{nDT} \cdot \Gamma^+, \quad (4.50)$$

mit dem Anteil der Brennstoffionen an der Elektronendichte n_e , i.e.

$$f_{nDT} = \sum_i c_i Z_i. \quad (4.51)$$

Die effektiven Verunreinigungsflüsse werden für jede Verunreinigungspezies i durch

$$\Gamma_i^+ = c_i \Gamma^+ \quad (4.52)$$

abgeschätzt.⁷⁵ Sämtliche effektive ZA'en $Y_{eff,i}$ der betrachteten Ionensorten i beziehen sich auf den Brennstoffionenfluss Γ_{DT}^+ , welcher bei Rechnungen mit Wandrecycling auch die Quellstärke für CELLSOR darstellt.

4.3.4. Zerstäubungsausbeuten

Kap. 3.4 enthält die physikalischen Grundlagen der PWW. Bei Aufprallenergien auf eine Wolframwand kommt es bei Deuteriumprojektilen ab Energien von 250 eV zur Zerstäubung; gemessen über die Anzahl erodierter Atome pro Projektil, i.e. über die Zerstäubungsausbeute (ZA) $Y \ll 1$.

Zur Abschätzung der ZA von leichten Projektilen wie D, T und ggf. He, wird - statt der Auswertung über die mittlere Energie - über deren Energieverteilung integriert.⁷⁶ Dies ist nötig, damit der Anteil schneller Ionen berücksichtigt wird, welche in der Schicht auf Energien oberhalb der *Zerstäubungsschwelle* beschleunigt werden.

Dies geschieht durch Integration über das Produkt aus der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) - $pdf_{max,Sh}$ - einer um das Schichtpotenzial verschobenen MBV, im Energieraum mit den i Energien E_i und der zugehörigen ZA $Y(\theta = 90^\circ, E_i)$:⁷⁷

$$\bar{Y} = \int_E dE pdf_{max,Sh} \cdot E \cdot Y(\theta = 90^\circ, E). \quad (4.53)$$

⁷⁵Dem Übersetzen von Dichteverhältnissen in Flussverhältnisse liegt die Annahme zu Grunde, dass die Fließgeschwindigkeit senkrecht zu den magnetischen Feldlinien im SOL für Verunreinigungionen ähnlich ist zu jener des Hintergrundplasmas. Starke Indizien für die Gültigkeit einer solchen Annahme wurden von Hollmann *et al.* puliziert.[63]

⁷⁶Man sieht anhand von Gl. 4.49 (Kap. 4.3.1) sehr klar, dass für typische Plasmatemperaturen von etwa 5 – 20 eV beim Schichteintritt, Deuteriumionen im Feld der Schicht auf Energien von ca. 25 – 100 eV beschleunigt werden. Damit lägen im Mittel sämtliche Deuteriumprojekte unterhalb der *Zerstäubungsschwelle* von Wolframtargetts; durch Integration über die über das Schichtpotenzial verschobene MBV erhält man endliche ZA $Y \leq 0$.

⁷⁷In einem ruhenden Gas bzw. Plasma, welches sich im thermischen Gleichgewicht befindet, folgen die Geschwindigkeiten der zum Ensemble der Temperatur T gehörenden Teilchen einer MBV. Diese lässt sich vom Geschwindigkeits- in den Energieraum übertragen und um das Schichtpotenzial auf der Energieachse verschieben.

Die *Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion* (pdf) in Gl. 4.53 lautet:

$$pdf_{max,Sh} = \frac{8\pi}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2\pi k_B T} \right)^{1,5} \sqrt{E - V_{Sh}} \exp \frac{-(E - V_{Sh})}{k_B T}. \quad (4.54)$$

Die ZA für normalen Wandeinfall in Gl. 4.53, i.e. $Y(\theta = 90^\circ, E)$, wird über eine Fitformel nach Eckstein berechnet.⁷⁸[36]

Die Temperatur wird in Gl. 4.49 in eV eingesetzt, in Gl. 4.54 jedoch in K.⁷⁹ Die Energien werden entsprechend in Gl. 4.54 in J sowie in Gl. 4.53 in eV umgerechnet.⁸⁰

Gl. 4.53 gibt die mittlere ZA einer Projektionspezies i beim Aufprall auf ein Wolframtarget an.⁸¹

4.4. Trajektorien erodierter Wandatome: der Monte Carlo Code CELLSOR ERO

Der MC CELLSOR ERO verwendet dieselbe Geometrie und Rechenmethodik wie CELLSOR, *verfolgt* allerdings - anstelle von Brennstoffneutralteilchen - erodierte Wolframatomatome als TT, deren Quelle aus den ZA'en und Flussanteilen der umgeladenen Neutralteilchen (CELLSOR) sowie im Plasma enthaltenen Ionenspezies konstruiert wird.⁸² CELLSOR ERO wurde entwickelt um globale Aussagen über die Selbstzerstäubung und prompte Redeposition durch bzw. von zuvor erodiertem Wolfram treffen zu können.

4.4.1. Konstruktion der Testteilchenquelle

Die Energie eines erodierten Wolframatoms hängt stark vom Energieübertrag des Projektils, welches zur Erosion führte, ab. Zur Konstruktion der Geschwindigkeitsverteilung eines Wolfram-TT in CELLSOR ERO, wird daher für jede Projektilspezies (Neutrale, Ionen) eine separate Thompson-Verteilung (TV) generiert. Dabei wird die entsprechende Verteilung anhand der effektiven ZA sämtlicher Ionenspezies i sowie der umgeladenen D-T-Neutralteilchen konstruiert.⁸³

⁷⁸ $Y(\theta = 90^\circ, E)$ wird anhand der Formeln 2-5 mit den Koeffizienten $\lambda, q, \mu, E_{th}, \epsilon, E_{sb}$ für die Projektile H, D, T, He, N, Ne, Ar, Kr, Xe, W mit Targetmaterial W aus Tab. 8 auf Seite 142 berechnet, jedoch für Formel 2-4 mit im Jahr 2012 durch R. Behrisch und W. Eckstein vorgenommenen Fehlerkorrekturen. Die energie- und winkelabhängigen ZA'en für den Beschuss eines Wolframfestkörpers durch Wasserstoffprojekte wurden exp. für glatt polierte Wolframproben ermittelt.[36] Van Eden *et al.* und Buzi *et al.* zeigten, dass eine solche Wolframoberfläche während der Plasmaexposition aufrauhet.[146, 20] Loarte *et al.* und Pitts *et al.* folgerten, dass dies die Bindungsstärke der Oberflächenatome und die Winkelverteilung der auftreffenden Projektile und somit die ZA verändert.[97, 116]

⁷⁹Die Umrechnung von eV zu K erfolgt durch Multiplikation mit 11604.

⁸⁰Die *Eckstein-Fitformel*[36] für $Y(\theta, E)$ verwendet die Einheit eV, während die grundlegendere *pdf* aus einer MBV die SI-Einheit J verwendet. Die Umrechnung von eV zu J erfolgt durch Multiplikation mit dem Zahlenwert der Elementarladung, i.e. mit $1,6021 \cdot 10^{-19}$.

⁸¹Typischerweise wird in CELLSOR und CELLSOR ERO mit effektiven ZA'en, welche zum auf die Wand strömenden Gesamtionenfluss Γ^+ normiert sind, gerechnet. Die Flussnormierung erfolgt wie in Gl. 4.52. Analog wird für \bar{Y}_{eff} Gl. 4.53 mit der Verunreinigungskonzentration c_i multipliziert.

⁸²Kap. 4.2.9 stellt eine Zusammenfassung der Funktionalität des CELLSOR-Codes dar.

⁸³An dieser Stelle werden die Schädigungsbeiträge durch die betrachteten Ionenspezies, also typischerweise D, T, He, N sowie W und die mithilfe von CELLSOR gerechneten Schadensbeiträge durch umgeladene D-T-Neutralteilchen aufsummiert und auf den Teilchenfluss Γ_\perp normiert. Dies geschieht unter der Annahme gemäß Hollmann *et al.*, dass die Dichteverhältnisse der verschiedenen Ionenspezies ungefähr deren Flussverhältnissen zur Wand entsprechen.[63, 64] Aus den effektiven Schädigungsbeiträgen wird also nach Gewichten gewürfelt, mit welcher TV ein erodiertes Wolframatom von der Wand ins Plasma des SOL startet.

Die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten TV ergibt sich für jede betrachtete Spezies i zu

$$p_i = \frac{\bar{Y}_{eff,i}}{\sum_i \bar{Y}_{eff,i}}. \quad (4.55)$$

Die TVen unterscheiden sich aufgrund der - für die erodierenden Teilchenspezies - unterschiedlichen mittleren Energien \bar{E} .

Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Thompson-Verteilung (TV)

Die Energieverteilung von erodiertem W wird typischerweise in Modellierungen über eine TV, welche um die halbe Bindungsenergie $E_{sb}/2$ verteilt ist, beschrieben;⁸⁴ mit einem *Cutoff* abh. von der mittleren Projektilenergie \bar{E} :^[140]

$$pdf_{thompson} = A \frac{E}{(E + E_{sb})^3}. \quad (4.56)$$

Das Auswürfeln eines Energiewerts für ein startendes TT wird typischerweise über eine *Verwerfungsmethode* durchgeführt.

Dazu wird die pdf in die *kumulative Dichtefunktion* (engl.: *cumulative density function*, kurz: *cdf*) übersetzt, i.e.

$$cdf_{thompson} = \int_0^{E_{max}} dE pdf_{thompson} = \frac{1}{2E_{sb}} - \frac{E_{max} + \frac{E_{sb}}{2}}{(E_{max} + E_{sb})^2}, \quad (4.57)$$

mit

$$E_{max}(\bar{E}) = \begin{cases} \gamma \bar{E} - E_{sb}, & \text{falls } \gamma \bar{E} \geq E_{sb} \\ \gamma \bar{E}, & \text{sonst} \end{cases}$$

und dem *Energieübertragungsfaktor*

$$\gamma = \frac{2m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2}. \quad (4.58)$$

Der MC-Code würfelt⁸⁵ eine *standardnormalverteilte* Zufallszahl x und prüft ob $\frac{x}{2E_{sb}}$ innerhalb der von 0 bis E_{max} integrierten pdf, i.e. der TV $cdf_{thompson}$ (Gl. 4.59), liegt.⁸⁶ Falls nicht, wird die gewürfelte Energie verworfen.

Bei Erfüllen der Bedingung $\frac{x}{2E_{sb}} \leq cdf_{thompson}$ wird die Energie mithilfe einer *Intervallschachtelungsmethode* so lange angepasst, bis

$$cdf_{thompson} = \left| \int_0^E dE pdf_{thompson} - \frac{x}{2E_{sb}} \right| \leq \delta \quad (4.59)$$

mit $\delta = 10^{-7}$ erfüllt wird. Die gewürfelte Zufallszahl x bleibt dabei bestehen.

⁸⁴Der 3-d MC-Code ERO [77, 2] rechnet die Moleküldynamik der PWW in Tokamaks und verwendet denselben Ansatz einer *Verwerfungsmethode* über eine nach Thompson verteilte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf) der Startenergien.

⁸⁵Technisch geschieht dies mithilfe der Methode `random()` aus `numerical python`.

⁸⁶Mithilfe dieser *Verwerfungsmethode* benötigt CELLSOR ERO $5,52 \cdot 10^{-5}$ Sekunden um einem TT eine nach Thompson verteilte Startenergie zuzuweisen.

Die Intervallschachtelung sorgt für eine immer feinere Anpassung von E innerhalb von $0 \leq E \leq E_{max}$ und damit der Wahrscheinlichkeit diese Energie über die TV anzutreffen, i.e. $p_E = \int_0^E dE pdf_{thompson}$.⁸⁷

Dabei gilt für jede Iteration j der Intervallschachtelung für ein initiales $E = 0$ bei $j = 0$:

$$E \rightarrow \begin{cases} E + dE, & \text{falls } \int_0^E dE pdf_{thompson} < \frac{x}{2E_{sb}} \\ E - dE, & \text{sonst,} \end{cases}$$

mit der während der Iterationen der Intervallschachtelung variierten Energieschrittweite

$$dE = \frac{E_{max}}{2^{j+1}}. \quad (4.60)$$

Da der Cutoff der TV sowohl vom Energieübertrag γ , also der Masse m des zuvor Zerstäubenden Ions / Neutralen, als auch von der mittleren Energie \bar{E} beim Wandaufprall abhängt, starten durch verschiedene Projektile erodierte Atome mit unterschiedlichen TVen.⁸⁸ Die mittlere Energie \bar{E} der umgeladenen Neutralteilchen (D, T) stammt aus einer vorherigen CELLSOR-Rechnung mit identischen Plasmaprofilen und wird beim Aufruf an ELLSOR ERO übergeben.

Winkelverteilung

Die Winkelverteilung des nach der Erosion von der Wand startenden Wolframatoms folgt gemäß Kirschner *et al.* analog zum ERO-Code einer $\cos(\theta)$ -Verteilung.[77] Der Geschwindigkeitsvektor \vec{v} wird - analog zur Vorgehensweise in CELLSOR - auf die x -Achse projiziert, sodass seine x -Komponente bei

$$v_x = -\sqrt{0...1} \cdot \sqrt{\frac{2E}{m_W}} \quad (4.61)$$

liegt.

4.4.2. Wechselwirkungen zwischen Testteilchen und Hintergrundplasma

Die modellierten WW'en zwischen dem erodierten Wolframatom und dem Hintergrundplasma beschränken sich auf die Ionisation durch Stöße mit dem Elektronenhintergrund, i.e.



Der Ratenkoeffizient wird über eine Fitformel von Vainshtein *et al.* (Formel 7) berechnet:[145]

$$\langle \sigma_{izv} \rangle = 10^{-8} \exp\left(\frac{-\Delta E_{iz}}{T_e}\right) rr(T_e) \quad (4.63)$$

und dabei geildet mit (Formel 8):

$$rr(T_e) = A \frac{\beta^{0.5} (\beta + 1 + D)}{(\beta + \chi)(\beta + 1)}, \quad \beta = \frac{z^2 Ry}{T_e}. \quad (4.64)$$

⁸⁷Abb. B.1 im Anh. B.3 zeigt die mit CELLSOR ERO generierte *pdf* von W-Atomen, welche durch D-Projektile mit einer Energie von 100 eV erodiert wurden.

⁸⁸Die Funktion `thompsonian_seed` wird entsprechend der nach p_i (aus Gl. 4.55) ausgewürfelten Projektilspezies mit der entsprechenden mittleren Energie \bar{E} und Masse m aufgerufen.

Die Koeffizienten D , χ und A können in der Arbeit von Vainshtein *et al.* gefunden werden; [145] weiterhin gilt $\Delta E = 7,86$ eV und $Ry = 13,6$ eV.⁸⁹

4.4.3. Berechnung der prompten Redeposition

CELLSOR ERO rechnet die durch Elektronenstöße bestimmte Eindringtiefe erodierter Wolframatome ins Plasma aus.⁹⁰

Der prompte Redepositionsanteil $f_{dep,i}$ eines TT wird mit folgender Formel nach Fussmann *et al.* berechnet:⁹¹ [47]

$$f_{dep,i} = 0,5 \left(1 + \operatorname{sgn}(1-p) \left(1 + \frac{4p^2}{(1-p^2)^2} \right)^{-0,5} \right), \quad (4.65)$$

mit $p = \lambda_{iz}/\rho_i$ und $\lambda_{iz} = |\vec{v}_i| / (n_e \langle \sigma v_i \rangle_{iz})$ sowie der Annahme, dass $|\vec{v}_i| = v_n$, i.e. dass die Geschwindigkeit v_n des Atoms bei der Ionisation als $|\vec{v}_i|$ übernommen wird, während die Gyrationbewegung zu normalem Wandeinfall führt.⁹²

Durch die Simulation von N TT wird eine Verteilung von Ionisationsradien $\lambda_{iz,i}$ erstellt, welche den Wandabständen am Ort der ersten Ionisation entsprechen. Der aus dieser Verteilung gemittelte prompte Redepositionsanteil \bar{f}_{dep} wird aus dem Mittelwert, der sich für ein Ensemble von N gerechneten TT - mit $f_{dep,i}$ nach Gl. 3.33 (Kap. 3) - ergibt, gebildet nach

$$\bar{f}_{dep} \approx \frac{\sum_{i=1}^N f_{dep,i}}{N}. \quad (4.66)$$

4.4.4. Wolframatomdichte

Neben einer Abschätzung der mittleren prompten Redeposition \bar{f}_{dep} erlaubt die Kenntnis der radialen Verteilung der Ionisation von Wolframatomen die Umrechnung in ein 1-d Dichteprofil, i.e.

$$n_W(\rho) = \frac{f_{rec} \bar{Y}_{eff}}{N} \sum_i \frac{w_i t_{dwell,i}}{V_{cell,i}}, \quad (4.67)$$

das Teilchengewicht ist im Falle von CELLSOR ERO stets $w_i = 1$. Im Vergleich zu Gl. 4.43 (Dichteverteilung von D-T-Neutralen) wird die Quellstärke f_{rec} mit der mittleren effektiven ZA \bar{Y}_{eff} aller erodierenden Projektilsorten multipliziert, damit der Recyclingfluss Γ^+ die gemeinsame Quellstärke bildet.⁹³

⁸⁹Die Wahrscheinlichkeiten werden wie in Gl. 4.20 (CELLSOR) ausgewürfelt.

⁹⁰Für globale Nettobetrachtungen der Erosion im Hauptraum muss die prompte Redeposition berücksichtigt werden, da ein erodiertes und prompt redeponierendes Oberflächenatom global gesehen nicht zum Abtrag der ersten Wand führt.

⁹¹In Kap. 3 wurde mit Gl. 3.33 eine allgemeinere Fitformel dargestellt, welche alternativ in CELLSOR ERO aufgerufen werden kann.

⁹²Für jedes TT der Geschwindigkeit v wird die radiale Position der Ionisation λ_{iz} sowie der Gyroradius ρ_i abgeschätzt. Dabei wird zwischen HFS und NFS gemittelt, d.h. der Gyroradius wird für das Magnetfeld B_0 auf der Polachse gebildet.

⁹³ Γ^+ bezeichnet den Ionenfluss, welcher auf die erste Wand im Hauptraum der Brennkammer strömt. Für ein DEMO, bei dem die Wand, aufgrund der Pulsdauern im Bereich einiger Stunden, als gesättigt gilt, ist Γ^+ äquivalent zum Recyclingfluss und bildet daher die Quellstärke für CELLSOR.

4.4.5. Selbsterstäubung durch $W^+ \rightarrow W$

Neben der prompten Redeposition und der radialen Dichteverteilung der Wolframotope wird bei einem *CELLSOR ERO*-Durchlauf die *Selbsterstäubung*, i.e. $W^+ \rightarrow W$, durch auf die Wand zurückkehrendes, nach der Erosion ionisiertes Wolfram abgeschätzt.⁹⁴

Die effektive *Selbsterstäubungsausbeute* $Y_{eff,W^+ \rightarrow W}$ wird - bezogen auf den initialen Quellfluss Γ^+ (Gesamtionenfluss auf die Wand) - durch

$$Y_{eff,W^+ \rightarrow W} = \bar{Y}_{eff} \bar{f}_{dep} \bar{Y}_{W^+ \rightarrow W} \quad (4.68)$$

berechnet, wobei $\bar{f}_{dep} \bar{Y}_{eff}$ den Anteil des Erosionsflusses am initialen Ionenfluss beschreibt, der prompt nach der Ionisation auf die Wand zurückkehrt.

Die mittlere SZA $\bar{Y}_{W^+ \rightarrow W}$ dieser prompt zurückkehrenden Wolframionen wird anhand der korrigierten *Eckstein-Fitformel*[36] (Kap. 4.3.4) für die Projektilenergie

$$E_W = \frac{1}{2} m_W v^2 \quad (4.69)$$

ermittelt, wobei die Geschwindigkeit v der Länge des Geschwindigkeitsvektors des W-TT zum Zeitpunkt der Ionisation entspricht. Dabei werden Beschleunigungseffekte im elektromagn. Feld der Schicht vernachlässigt.⁹⁵

Anschließend wird für N simulierte TT über den auf die Wand zurückprallenden Anteil summiert, i.e. die effektive mittlere *Selbsterstäubungsausbeute* ergibt sich zu

$$\bar{Y}_{eff,W^+ \rightarrow W} = \frac{\sum_{i=1}^{N'} Y_{eff,W^+ \rightarrow W,i}}{N'} \quad (4.70)$$

Der auf die Wand zurückprallende Anteil wird durch den prompten Redepositionsanteil abgeschätzt zu $N' = \bar{f}_{dep} \cdot N$.

4.5. Teilchenbilanz im *Scrape-Off-Layer* (SOL)

Die Teilchenbilanz ist ein wesentlicher Aspekt einer konsistenten Betrachtung der Verhältnisse im SOL. In Kap. 4.3.3 wurde erläutert, in welcher Beziehung die Wandflüsse der Verunreinigungionen Γ_i^+ zum Brennstoffionenfluss Γ_{DT}^+ , welcher im Recyclingfall die Quellstärke des *CELLSOR*-Codes bildet, stehen.

Der Brennstoffionenfluss Γ_{DT}^+ ist allerdings zunächst unbekannt. Er lässt sich unter Annahmen der Transportstärken senkrecht und parallel zu den magnetischen Feldlinien sowie über volumetrische Quellen durch Ionisation und Randbedingungen an der Separatrix und der ersten Wand im Hauptraum konsistent berechnen. Die volumetrische Ionisationsquelle wird dabei aus der mit *CELLSOR* berechneten Neutralteilchendichte $n_n(\rho)$ konstuiert. Jede Rechnung von $n_n(\rho)$ ist ausschließlich für ein bestimmtes Ionendichteprofil $n_i(\rho)$, welches im SOL vorgegeben wird, gültig. Gleichzeitig beeinflusst $n_n(\rho)$ über die Teilchenbilanz, durch Veränderung der Ionisationsraten im SOL, das Ionendichteprofil $n_i(\rho)$, sodass eine konsistente Lösung ggf. mehrere Iterationen Bedarf. Im Folgenden wird erklärt, wie eine solche konsistente Lösung gefunden wird.

⁹⁴Gewissermaßen bilden die prompte Redeposition bzw. die Selbsterstäubung eine abschwächende bzw. verstärkende Korrektur der berechneten Bruttoerosion.

⁹⁵Nach der Ionisation dauert die prompte Redeposition eines TT, welches mit $v = 5 \text{ ms}^{-1}$ in einem 6 T starken toroidalen Magnetfeld ionisiert wurde, ca. 100 μs . Die Thermalisierung des W^+ -Ions mit dem Plasmahintergrund ist daher unwahrscheinlich; $v = 5 \text{ ms}^{-1}$ ist ein typischer Wert für ein W-TT, welches durch T-Beschuss mit $\bar{E} \approx 150 \text{ eV}$ erodiert wurde.

4.5.1. Analytische Lösung der Kontinuitätsgleichung im Scrape-Off-Layer

Die stationäre *Kontinuitätsgleichung*, i.e. $\vec{\nabla} \cdot \vec{\Gamma} = \vec{S}$, lautet im SOL in kartesischen Koordinaten (x, y, z) und differentieller Schreibweise:

$$\frac{d}{dx} \left(-D_{\perp} \frac{dn_i}{dx} + n_i v_{\perp} \right) = -\frac{n_i}{\tau_{\parallel}} + S. \quad (4.71)$$

In Gl. 4.71 wurden bereits Komponenten der *Kontinuitätsgleichung*, die Null ergeben, also $\delta_{\phi} \Gamma_{\phi}$, weggelassen. Der Fluss wurde in Gl. 4.71 zudem in Komponenten senkrecht zu den magn. Feldlinien, i.e.

$$\Gamma_{\perp} = -D_{\perp} \frac{dn_i}{dx} + n_i v_{\perp}, \quad (4.72)$$

und parallel zu den magn. Feldlinien, i.e.

$$\Gamma_{\parallel} = n_i v_{\parallel}, \quad (4.73)$$

aufgeteilt, mit $v_{\parallel} = c_{s,eff} = \pi R \tau_{\parallel}^{-1}$.

Kartesische Koordinaten wurden gewählt, damit analytische Lösungen auffindbar sind.⁹⁶

Randbedingungen

Gl. 4.71 ist vom Typ einer inhomogenen Differentialgleichung (DGL) 2. Ordnung. Zum Lösen werden zwei Randbedingungen benötigt, die an der Separatrix und der Wand getroffen werden. An der Separatrix wird eine Dirichlet-Randbedingung vorgegeben, i.e. die Dichte n_{sep} wird vorgegeben, und an der ersten Wand wird eine Neumann-Randbedingung vorgegeben, i.e. die Stärke des Dichteabfalls wird vorgegeben:

$$x = 0 : n = n_{sep}; \quad x = \Delta_{SOL} : \nabla n_{wall} = -\frac{n_{wall}}{\delta}. \quad (4.74)$$

Der δ -Parameter in Gl. 4.74, welcher für einen bestimmten Dichtegradienten ∇n einer Abfalllänge λ_n entspräche, wird dabei so gewählt, dass eine Abfalllänge im Bereich der Ausdehnung der Vorschicht liegt, da innerhalb jener Zone nicht mehr die Stärke des senkrechten Transports (Diffusion, Konvektion) den Abfall der Dichte zur Wand festlegt, sondern vielmehr die Kinetik aufgrund der hier vorherrschenden elektromagn. Kraftfelder.⁹⁷

Eine weitere wichtige Annahme zur analytischen Lösbarkeit von Gl. 4.71 ist jene, dass die *Transportparameter*, i.e. D_{\perp} , v_{\perp} sowie τ_{loss} , räumliche Konstanten darstellen, d.h. räumlichen Mittelwerten in zwei Dimensionen (x, z) entsprechen. Insbesondere der Parameter τ_{\parallel} , der die mittlere Verlustzeit von Ionen in paralleler Richtung entlang der magn. Feldlinien beschreibt, wäre bei einer lokalen Behandlung in x - sowie z -Richtung sehr unterschiedlich, da er proportional zur *Ionenschallgeschwindigkeit*, i.e. $c_s \propto \sqrt{T}$ ist und da im SOL nahe der Separatrix typischerweise starke Temperaturgradienten in x -Richtung vorherrschen sowie nahe des x-Punktes starke Gradienten in z -Richtung.

⁹⁶In *Zylinderkoordinaten* (ρ, ϕ, z) würde über die *Funktionaldeterminante* $\rho d\rho d\phi dz$ eine Lösungsdimension für Lösungen mit radialen Komponenten, welche hier explizit gesucht werden, hinzukommen. Die Wahl kartesischer Koordinaten beugt verlängerten Rechenzeiten und numerischen Problemen bei der Lösungsfindung vor.

⁹⁷Es gilt, dass der δ -Parameter nach unten beschränkt und ansonsten frei wählbar ist, d.h. mindestens dem Ionen-Larmor-Radius $\delta \geq 4 \cdot 10^{-3}$ m entspricht. Analoge Randbedingungen wurden von Dux sowie Tokar *et al.* getroffen.[34, 141]

Gesamtlösung für ursprüngliche Variablen

Der Algorithmus zur analytischen Lösung von Gl. 4.71 durch Variation der Konstanten wird im Anh. B.2 dargestellt.⁹⁸ Betrachtet man die Gleichungen im Anh. B.2, so folgt die Gesamtlösung der radialen Ionendichte im SOL, mit Hilfe der Funktionale Ψ_1 , Ψ_2 und η , für die ursprünglichen Variablen als Lösung der inhomogenen Gl. in geschlossener analytischer Form:

$$n_i(x) = n_s \frac{\exp\left(\lambda_2 \frac{x}{\Delta_{SOL}}\right) - \rho \exp\left(\lambda_2 - \lambda_1 \frac{\Delta_{SOL} - x}{\Delta_{SOL}}\right)}{1 - \rho \exp(\lambda_2 - \lambda_1) + \Psi_1(0) \exp(-\lambda_1) - \Psi_2(0)} + n_s \frac{\Psi_1(x) \exp\left(-\lambda_1 \frac{\Delta_{SOL} - x}{\Delta_{SOL}}\right) - \Psi_2(x) \exp\left(\lambda_2 \frac{x}{\Delta_{SOL}}\right)}{1 - \rho \exp(\lambda_2 - \lambda_1) + \Psi_1(0) \exp(-\lambda_1) - \Psi_2(0)} \quad (4.75)$$

mit

$$\rho = 1 + \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_1}, \quad \eta = 1 + \frac{\lambda_2}{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_1}, \quad (4.76)$$

sowie den Funktionalen

$$\Psi_1(x) = \eta \int_x^{\Delta_{SOL}} Q(x) \exp\left(\lambda_2 - \lambda_1 \frac{x}{\Delta_{SOL}}\right) dx \quad (4.77)$$

und

$$\Psi_2(x) = \eta \int_x^{\Delta_{SOL}} Q(x) \exp\left(\lambda_2 \frac{\Delta_{SOL} - x}{\Delta_{SOL}} - \lambda_1\right) dx. \quad (4.78)$$

Der Ionisations-Quellterm S wurde substituiert in die auf den Recyclingfluss normierte Größe

$$Q(x) = \langle \sigma v_x \rangle_{iz}(T_e) n_i(x) \lambda_n(x), \quad (4.79)$$

mit $\lambda_n(x) = n_n(x)/\Gamma_\perp$ [m^{-1}]: normierte Neutralteilchendichte des mit MC gerechneten Ensembles (skaliert mit dem Recyclingkoeffizienten: $0 \leq R_{rec} \leq 1$). Die verwendete volumetrische Quellstärke $Q(x)$ wird stets aufgrund der initial angenommenen bzw. bei der zuverigen Iteration berechneten Ionendichte konstruiert.⁹⁹

4.5.2. Iterationsschema und Konvergenzkriterium

Gl. 4.75 gibt die physikalische der beiden analytischen Lösungen der *Kontinuitätsgleichung* im SOL an. Mithilfe des MC-Codes CELLSOR wird dabei für eine vorgegebene Ionendichte $n_i(x)$ der *Ionisationsquellterm* $Q(x)$ berechnet. Die Ionendichte im SOL wird zunächst für den quellfreien Fall, i.e. $Q(x) = 0$, anhand der Transportparameter D_\perp und v_\perp in senkrechter Richtung sowie v_\parallel in paralleler Richtung berechnet:

$$n_n^0(x) = 0 \Rightarrow Q_0 = 0 \Rightarrow \Psi_{1,2}^0(x) = 0 \Rightarrow n_i^0(x) = n_s \frac{\exp\left(\lambda_2 \frac{x}{\Delta_{SOL}}\right) - \rho \exp\left[\lambda_2 - \lambda_1 \left(\frac{\Delta_{SOL} - x}{\Delta_{SOL}}\right)\right]}{1 - \rho \exp(\lambda_2 - \lambda_1)}. \quad (4.80)$$

⁹⁸Für das Auffinden der Lösung zeigte sich Prof. Dr. Mikhail Tokar hauptverantwortlich.

⁹⁹Der Ansatz für derartige Kopplungen (Kinetik-Fluid) ist nicht exklusiv. Wiesen *et al.* publizierten mit *SOLPS-ITER* ein wichtiges neues Werkzeug für die ITER-Modellierung; dieses besteht aus der Kopplung des *Fluidcodes* B2.5 mit dem kinetischen MC-Code EIRENE.[157] SOLPS bezeichnet wiederum eine bestimmte Version des Code-Pakets B2-EIRENE.[130, 122]

Daraus ergibt sich die erste Abschätzung der Neutralteilchendichte $n_n^0(x)$ sowie des Quellterms $Q^0(x)$ der inhomogenen Gl. 4.75. Die Ionendichte wird anschließend mit dem *Ionisationsquellterm* (aus der vorherigen Iteration l), dessen Gewichtung über die Multiplikation mit einem Mischfaktor $0 \leq A_{mix} \leq 1$ festgelegt wird, neu berechnet. Dazu wird mithilfe von CELLSOR die Neutralteilchendichte $n_n^l(x)$ für das aus der vorherigen Iteration gefolgerte Ionendichteprofil $n_i^{l-1}(x)$ berechnet. Der Ausdruck für den Quellterm lautet dann:

$$\begin{aligned} Q_l(x) &= (1 - A_{mix})Q_{l-1}(x) + A_{mix}\langle\sigma v_x\rangle_{iz}n_i^{l-1}(x)n_n^l(x) \\ &\Rightarrow \Psi_{1,2}^l(x) \Rightarrow n_i^l(x). \end{aligned} \quad (4.81)$$

Als *Konvergenzkriterium* wird die Änderung der Ionendichte an der Wand ($x = \Delta_{SOL}$), nach zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten l und $l - 1$, herangezogen. Dabei gilt für die Änderung, i.e.

$$\delta_{n_{wall}} = \left| \frac{n_{wall}^l - n_{wall}^{l-1}}{n_{wall}^{l-1}} \right|, \quad (4.82)$$

im Konvergenzfall, dass

$$\delta_{n_{wall}} < \epsilon \cdot A_{mix}. \quad (4.83)$$

Ein alternatives Konvergenzkriterium für starke Ionisationsquellen nahe der Separatrix bildet die Änderung der über den SOL linienintegrierten Neutralteilchendichte:

$$\bar{n}_n^l = \Delta_{SOL}^{-1} \int_{\Delta_{SOL}} dx n_n^l(x), \quad (4.84)$$

also

$$\delta_{\bar{n}_n} = \left| \frac{\bar{n}_n^l - \bar{n}_n^{l-1}}{\bar{n}_n^{l-1}} \right|, \quad (4.85)$$

mit

$$\delta_{\bar{n}_n} < \epsilon \cdot A_{mix}. \quad (4.86)$$

4.5.3. Berechnung des Ionenflusses zur Wand

Der Ionenfluss Γ_{DT}^+ zur Wand im Hauptraum der Brennkammer, welcher durch diffusiven und konvektiven Transport senkrecht zu den magn. Feldlinien bestimmt wird, ergibt sich zu

$$\Gamma_{DT}^+(\Delta_{SOL}) = -D_{\perp} \nabla n_i(\Delta_{SOL}) + n_i(\Delta_{SOL})v_{\perp}. \quad (4.87)$$

Gl. 4.88 liegt die Annahme zu Grunde, dass D_{\perp} und v_{\perp} über die gesamte Breite des SOL konstant sind. Der Dichtegradient $\nabla n_i(\Delta_{SOL})$ wird durch die lineare Änderung der mit Gl. 4.75 im Konvergenzfall gebildeten Dichte, im Abstand eines winzigen $\epsilon \ll \Delta_{SOL}$, approximiert zu

$$\nabla n_i(\Delta_{SOL}) \approx \frac{n_i(\Delta_{SOL} - \epsilon) - n_i(\Delta_{SOL})}{\epsilon}. \quad (4.88)$$

Mithilfe des Ionenflusses können die im Ensemble gerechneten CELLSOR-Ergebnisse auf die aus den (Transport-)Annahmen resultierende Quellstärke skaliert werden. Die ZA kann unter Kenntnis des Wandflusses in eine Erosionsrate übersetzt werden.

4.6. Teilchenbilanz zwischen Hauptplasma und Scrape-Off-Layer

Kap. 4.5 behandelte die Teilchenbilanz im SOL. Aufgrund der Wahl der Randbedingungen als Dirichlet- (Separatrixdichte: n_{sep}) bzw. Neumann-Randbedingung (Dichteabfall an der ersten Wand) sowie der Vorgabe der senkrechten Transportstärke (D_{\perp} , v_{\perp}) und der mittleren Verlustzeit entlang magn. Feldlinien (τ_{\parallel}), wird einerseits eine selbstkonsistente Lösung der Ionendichte $n_i(\rho)$ sowie des Teilchenflusses Γ_{\perp} auf die erste Wand ermittelt, andererseits jedoch nicht der in den SOL strömende Teilchenzufluss als Randbedingung vorgegeben bzw. begrenzt.¹⁰⁰

Im Rahmen der DEMO1-Erosionsstudien (Kap. 6) ergibt es Sinn sich auf eine im Kernplasma fest vorgegebene Fusionsleistung P_{Fus} zu beziehen. Diese legt für eine Maschine mit DT-Plasma die Vernichtungsrate des Brennstoffs sowie die Entstehungsrate von Heliumverunreinigungen im Kernplasma fest.

Weiterhin wird durch die Annahmen des Transports innerhalb des SOL festgelegt, welcher nicht-verbrannte Ionenanteil aus dem Kernplasma in den SOL strömt; die stationäre Heliumkonzentration wird durch den nicht verbrannten Brennstoffanteil im Kernplasma festgelegt.

4.6.1. Bestimmung der stationären Heliumkonzentration im Kernplasma

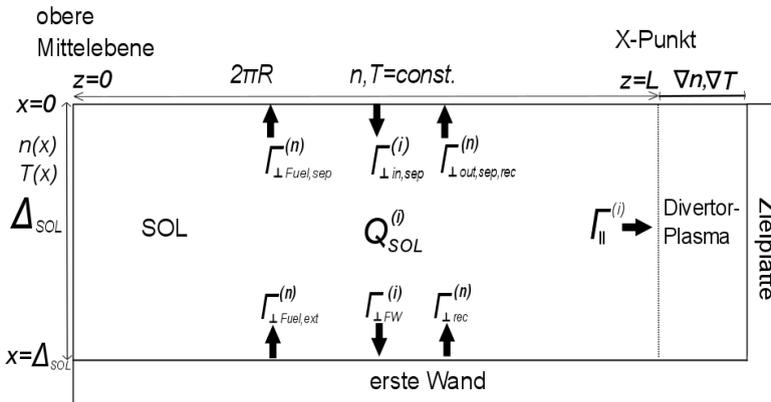


Abbildung 4.3.: Darstellung des flach ausgestreckten SOL und der Ionen- sowie Neutralteilchenflüsse Γ (analog zur Darstellung der Raten Φ in Gl. (4.89) - (4.97); Index (i): Ionen sowie (n): Neutrale. Die Flussbilanz wird in z -Richtung zwischen oberer Mittelebene sowie an den x -Punkt angrenzend betrachtet.

Zur Erfüllung der Teilchenbilanz zwischen Hauptplasma und SOL ergibt sich aus der Stationaritätsbedingung im Kernplasma, dass der Neutralteilchenzufluss, der netto über die Separatrix ins Kernplasma strömt, gleich dem Ionenabfluss, der über die Separatrix in den SOL strömt, sein muss. Unverbrannte D-T-Ionen strömen mit der Rate

$$\Phi_{sep, in, i} \approx \left(\frac{1}{c_{He}} \right) \Phi_{DT}, \quad (4.89)$$

in den SOL.

¹⁰⁰Das bedeutet, dass der Teilchenzufluss aus dem Hauptplasma, der über die Separatrix auswärts strömt, für unterschiedliche Transportstärken, Separatrixdichten und eff. Mach-Zahlen \bar{M} stark verschieden sein kann.

Dabei lautet die D-T-Verbrennungsrate:

$$\Phi_{DT} = \frac{P_{Fus}}{\Delta E_{DT}}, \quad (4.90)$$

mit $\Delta E_{DT} = 17,6 \text{ MeV} \approx 2,82 \cdot 10^{-12} \text{ J}$.

Die Rate $\Phi_{sep,in,i}$ muss gleich der Nettorate sein, mit der Brennstoff-Neutralteilchen durch das *Fuelling* und *Wandrecycling* ins Kernplasma strömen und dort ionisieren.

Gleichzeitig gilt, dass der Ionenfluss, der - analog zu den Ionenquellen innerhalb des SOL - in den SOL strömt, sich auf die beiden Senken, i.e. die Wand im Hauptraum sowie die Targetplatten des Divertors, aufteilt. Also im Bild der Raten:

$$\Phi_{sep,in,i} = \Phi_{sep,out,i} = \Phi_{\perp FW} + \Phi_{\parallel SOL} - Q_{SOL}, \quad (4.91)$$

ergo

$$\Phi_{\perp FW} + \Phi_{\parallel SOL} - Q_{SOL} = \left(\frac{1}{c_{He}} \right) \Phi_{DT}. \quad (4.92)$$

Eine erste Abschätzung der Helium-Konzentration lautet daher:

$$c_{He} = \frac{\Phi_{DT}}{(\Phi_{\parallel SOL} + \Phi_{\perp FW} - Q_{SOL})}. \quad (4.93)$$

Abb. 4.3 zeigt eine Darstellung des vereinfachten, flach ausgestreckten SOL sowie der Teilchenflüsse Γ der Neutralen und Ionen, die an den Aussenkanten in den SOL hinein bzw. aus dem SOL heraus strömen.

Die Rate $\Phi_{\perp FW}$ an Teilchen, die senkrecht auf die erste Wand strömen, ist aus der MC-Rechnung ebenso bekannt wie die Volumenquelle Q_{SOL} (durch *Elektronenstoßionisation*) innerhalb des SOL, welche aus

$$Q_{SOL} = \frac{V_{SOL}}{\Delta_{SOL}} \int_{\Delta_{SOL}} dp n_n n_i \langle \sigma v \rangle_{iz} \quad (4.94)$$

folgt, sowie der Rate $\Phi_{\parallel SOL}$ in paralleler Richtung hin zum x-Punkt bzw. Divertor, i.e.

$$\Phi_{\parallel SOL} = \frac{A_{div}}{\Delta_{SOL}} \int_{\Delta_{SOL}} dp n_i c_s. \quad (4.95)$$

4.6.2. Bestimmung des Teilchenzuflusses der externen Brennstoffzufuhr

Betrachtet man die Randbedingung der Betragsgleichheit von Quellen und Senken im Kernplasma, also die Bedingung, dass der Kernplasma-Zufluss an Brennstoffneutralteilchen, welcher sich zusammensetzt aus Neutralen des Wandrecyclings sowie der externen wandseitigen Brennstoffzufuhr, i.e.

$$\Phi_{sep,out}^n = f_{sep,rec} \Phi_{rec}^n + f_{sep,ext} \Phi_{ext}^n, \quad (4.96)$$

mit $f_{sep,rec}$: Nettoanteil der von der Wand mit der Rate Φ_{rec}^n startenden Recyclingneutralen, sowie $f_{sep,ext}$: ins Kernplasma strömender Nettoanteil der extern von der Wand mit der Rate Φ_{ext}^n zugeführten Brennstoffneutralen, gleich sein muss mit $\Phi_{sep,in,i}$ aus Gl. 4.89, dann folgt

$$\Phi_{ext}^n = \frac{c_{He}^{-1} \Phi_{DT} - f_{sep,rec} \Phi_{rec}^n}{f_{sep,ext}}. \quad (4.97)$$

Beispielsweise ist $f_{sep,ext} = 1/3,5$ im Falle der Gaszufuhr bei einem Wandabstand von $\Delta_{SOL} = 5$ cm bzw. $f_{sep,ext} = 1/5,5$ bei einem Wandabstand von $\Delta_{SOL} = 20$ cm. Dies bedeutet, dass für den Schritt $\Delta_{SOL} = 5 \rightarrow 20$ cm 57 Prozent mehr Brennstoff am Ausgang des Gasventils bereitgestellt werden müssen, um dieselbe Brennstoff-Ionisationsrate im Kernplasma zu gewährleisten. Selbst bei $\Delta_{SOL} = 5$ cm würden 71 % des in die Brennkammer eingeblasenen Brennstoffs innerhalb des SOL ionisiert und zu den Ziellplatten des Divertors abgeführt.

4.7. Ausblick für zukünftige Weiterentwicklungen

Das Temperaturprofil im SOL wurde nach einem *Multi-Maschinen-Skalierungsgesetz* von Eich *et al.* anhand der Parameter des *Baseline Scenarios* für DEMO1 vorgegeben.[39] Als Ausblick für weitere Verbesserungen am Modell könnten die Lösungen der *Kontinuitätsgleichung* im SOL um eine selbstkonsistente Lösung der *Energiebilanzgleichung* erweitert werden. Die berechnete Zerstäubung durch auf die Wand prallende CX-Neutrale dürfte dadurch allerdings kaum verändert werden, da die hohen Energien durch CX-Stöße im heißen Pedestal entstehen, sodass kleinere Änderungen der lokalen Temperaturen im SOL nur geringe Auswirkungen auf die dortigen freien Wegstrecken für atomare Wechselwirkungsprozesse hätten.

Auch Erweiterungen um *Rauigkeitseffekte* der ersten Wand sowie ein *statistisches Modell* zur verbesserten Beschreibung des konvektiven Transports im SOL erscheinen denkbar. Dazu müsste allerdings die Frage, ob die Auswirkungen auf die Erosionsraten ausreichend groß wären, um den erheblich gesteigerten Rechenbedarf zu rechtfertigen, positiv beantwortet werden.

Kapitel 5.

Benchmark-Rechnungen der Codes CELLSOR und EIRENE

In Kap. 4 wurde die Modellierung der PWW beschrieben. Die Schädigung durch Brennstoffneutronen, i.e D und T, welche nach Ladungsaustausch (CX)-Stößen mit heißen Plasmaionen hochenergetisch auf die erste Wand in der Brennkammer fliegen, erfolgt mithilfe des eigens zu diesem Zwecke geschriebenen MC-Codes CELLSOR (Kap. 4.2).

CELLSOR kann als computerbasiertes, virtuelles physikalisches Experiment betrachtet werden. Ergebnisse hängen dabei von den gewählten Startparametern ab, also von den experimentellen Bedingungen. Das mathematische Modell verfolgt das Ziel sämtliche physikalischen Wechselwirkungen, welche zur Lösung der wissenschaftlichen Fragestellung relevant erscheinen, in einem System möglichst realitätsgetreu zu Modellieren.

Dabei werden im Modell *Vereinfachungen*¹ gegenüber der Realität getroffen, welche einerseits die Ergebnisse möglichst wenig verändern, und andererseits den Rechenumfang möglichst minimieren sollten.

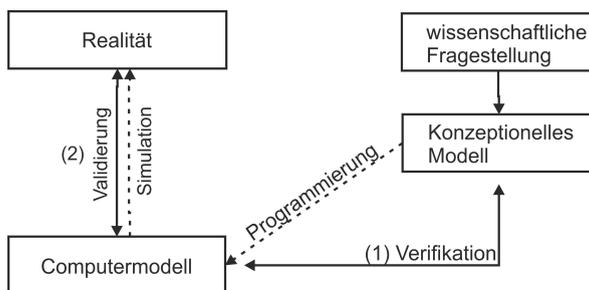


Abbildung 5.1.: Schema zur Verifikation und Validierung eines Computermodells.

Dabei gilt es zunächst zu Überprüfen, ob ein konzeptionelles Modell durch ein daraus entwickeltes Computermodell korrekt abgebildet wird. Man könnte auch sagen, dass geprüft wird, ob sämtliche Gleichungen korrekt aufgestellt und gelöst werden. Diesen Vorgang bezeichnet man als *Verifikation*.

Ein weiterer Schritt wäre es zu prüfen, inwieweit ein verifiziertes Modell in der Lage ist, die hochkomplexe Realität wiederzugeben, d.h. die Gleichungen des Modells und dessen Komplexität auf Vollständigkeit zu überprüfen. Dabei wird von der *Validierung* eines Modells gesprochen. Abb. 5.1 zeigt ein Schema zur Verifikation und Validierung eines Computermodells.

Die Verifikation kann über den Vergleich mit einem bereits verifizierten Computermodell erfolgen, welches darüber hinaus idealerweise bereits durch Vergleiche mit Experimenten validiert wurde. Zusätzlich können einfache Plausibilitätskontrollen - insbesondere in der Frühphase der numerischen Umsetzung eines Konzepts - Fehler, die zu Inkonsistenzen jeglicher Art führen, auf einfache Weise aufdecken.

¹Jedes mathematische Modell, welches bestimmte Teilaspekte der Realität modelliert, arbeitet auf einer bestimmten - und sehr unterschiedlichen - Ebene mit Vereinfachungen gegenüber der Realität.

5.1. Vergleichsrechnungen mit dem validierten Monte-Carlo-Code EIRENE

Zur Verifizierung von CELLSOR wurden Vergleichsrechnungen mit dem verifizierten und validierten 3d MC-Code EIRENE[120] durchgeführt.² EIRENE erlangte durch diverse Modellierungen der Randschicht und Divertor-Verhältnisse eine breite Akzeptanz in der Fusionsgemeinschaft.

5.1.1. Modellspezifikationen der EIRENE- und CELLSOR-Rechnungen

Zur Verifizierung von CELLSOR durch Vergleichsrechnungen mit EIRENE[119, 121] sollten die in beiden Modellen zugelassenen Wechselwirkungen zwischen Testteilchen (TT) und Plasmahintergrund übereinstimmen. Um dies zu gewährleisten wurden die physikalischen Wechselwirkungen der EIRENE-Läufe auf jene der Gleichungen 4.22 - 4.29 aus Kap. 4.2 reduziert.

EIRENE rechnete in beiden Fällen mit 501 nicht-äquidistanten Markerpositionen, welche vorwiegend in der Nähe der Separatrix lokalisiert waren.³ Im Plasmazentrum beträgt die Breite einer Zelle bei EIRENE im ITER-Testfall 36,7 mm, während diese Nahe der Separatrix bei 0,6-0,8 mm liegt. Das Verhältnis der maximalen zur minimalen Zellbreite liegt bei 61,3 (ITER) bzw. 62,4 (DEMO). Im ITER- bzw. DEMO-Fall befanden sich 76 bzw. 114 der 501 Zellen innerhalb des SOL, d.h. innerhalb eines Abstandes von 10 bzw. 20 cm zur Wand.

Eine zusätzliche Option in CELLSOR erlaubt es, den Geschwindigkeitsvektor, eines TT nach einem CX-Stoß, i.e. $v = \sqrt{2E/m}$, auf drei verschiedene Weisen zu erzeugen:

- mono-energetisch um den Mittelwert einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung (MBV) mit $\bar{E} = 1,5k_B T_i(\rho)$ (analog zum Standardmodell für atomare TT; Seite 125 im EIRENE-Handbuch[120]),
- aus einer MBV um die Ionentemperatur $T_i(\rho)$ in der Zelle (Gl. 4.30, Kap. 4),
- aus einer *modifizierten MBV* um die Ionentemperatur $T_i(\rho)$ in der Zelle, generiert nach Cupini *et al.* mithilfe einer *Verwerfungsmethode*, unter Berücksichtigung der Differenz zwischen Geschwindigkeitsvektor \vec{v} des TT und eines zufälligen Geschwindigkeitsvektors aus einer MBV (Gl. 4.32, Kap. 4).[29]

Letztere Variante ist dabei das beste Abbild der physikalischen Realität. Vergleichsrechnungen zwischen den drei Methoden offenbarten eine nahezu identische Neutralgasdichte im Falle vieler simulierter TT, da die Geschwindigkeiten nach der Umladung im Mittel zur MBV identisch sind; die mittlere Energie der auf die Wand prallenden Neutralen wird jedoch verändert.

²EIRENE wurde im Jahr 1985 aus einer Umbenennung des Codes *AURORA* gegründet. Seither wurden zahlreiche wissenschaftliche Papiere, welche auf EIRENE-Modellierungen stützen, publiziert. Lisgo *et al.* modellierten z.B. den Neutralgasdruck im Divertor von *Alcator C-Mod*, Guo *et al.* modellierten die Leistung an den Divertor-Targets des Experimental Advanced Superconducting Tokamak (EAST), Guillemaut *et al.* modellierten das Divertor-Detachment am JET und Harting *et al.* berechneten die Wolfram-Zerstäubung der ITER-like wall (ILW) am JET.[95, 57, 56, 58] EIRENE Modellierungen wurden dazu mit Plasmafluidmodellierungen der Codes B2 und EDGE-2D kombiniert. EIRENE wurde ferner von Kotov *et al.* verwendet, um die Erosion der ersten Wand an ITER, welche bedeutend durch hochenergetische Neutralteilchen mitverursacht werden könnte, zu modellieren.[82]

³In CELLSOR wurde die Option eingebaut, beliebige Zellpositionen und die zugehörigen Zellrandpositionen, welche nicht-äquidistant sein dürfen, aus durch EIRENE erzeugte .out-Dateien einzulesen und für die Rechnung zu übernehmen. Dies geschah, um Diskretisierungsunterschiede als Ursache für Abweichungen in den Resultaten beider Codes auszuschließen.

Die Ursache dafür ist, dass bei Verwendung der exakteren Verteilungen im Vergleich zum monoenergetischen Fall des Mittelwerts, bevorzugt jene Teilchen die Wand erreichen, welche in der Verteilung bei Energien oberhalb des Mittelwerts liegen, i.e. langsamere Teilchen werden im SOL *abgeschirmt*. Die mittlere Energie der Teilchen beim Wandaufprall ist für Erosionsstudien von höchster Relevanz. Folglich sollte - ausser im Falle dieser EIRENE-Vergleiche zur Verifizierung - stets mit der *Verwerfungsmethode* nach Cupini *et al.* gerechnet werden.

Bei den EIRENE-Rechnungen wurden die Geschwindigkeiten nach CX-Stößen monoenergetisch zugewiesen. CELLSOR rechnet ferner mit Vektoren im 3-d Torus, während EIRENE aus Rechenzeitgründen in einer Kreisgeometrie rechnet, i.e. dem poloidalen Querschnitt am Ort eines verschwindenden Poloidalwinkels.

5.1.2. Definition der Referenzfälle

Für die Vergleichsrechnungen wurden zwei Referenzfälle definiert, welche in der Auswahl der Parameterwerte an ITER und DEMO angelehnt wurden; die hier verwendeten DEMO-Werte entsprechen nicht zwingend jenen der *Baseline Parameter*. Vielmehr war das Ziel zwei für beide Codes identische Parametersätze, welche sich deutlich unterscheiden, zu einem verbesserten Vergleich heranzuziehen. Die Testfälle werden im Folgenden mit ITER- und DEMO-Testfall bezeichnet.

Tabelle 5.1.: Parameter der CELLSOR- und EIRENE-Vergleichsstudien für den ITER- und DEMO-Testfall.

Parameter	Zahlenwert	Einheit	Literaturquelle
	ITER / DEMO		ITER / DEMO
n_0	1,2 / 1,2	10^{20} m^{-3}	- / -
T_0	10 / 24,9	keV	- / -
α_n	0,3 / 0,5	-	- / -
α_T	0,5 / 1	-	- / -
n_{ped}	0,8 / 0,67	10^{20} m^{-3}	[102] / -
n_{sep}	0,35 / 0,2	10^{20} m^{-3}	[102] / -
T_{ped}	5 / 5,6	keV	[102] / [154]
T_{sep}	0,2 / 0,2	keV	[102] / [94]
Δ_{ped}	0,04 / 0,07	-	[102] / [154]
λ_n	0,034 / 0,13	m	[102] / [104]
λ_T	0,017 / 0,001	m	[102] / [39]
T_{min}	0,005 / 0,01	keV	- / [94]
Δ_{SOL}	0,1 / 0,2	m	[102] / -
a	2 / 2,643	m	[68] / [160]
R_0	6.2 / 9	m	[68] / [160]
Γ_{D^+}	1 / 10	$10^{20} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$	[82] (avg.) / -
T_{wall}	500 / 800	K	[64] / -
E_{D^+}	0,04 / 0,1	keV	- / -

Tab. 5.1 zeigt die Startparameter des ITER- und DEMO-Testfalls. Bei den Plasmaprofilen gilt $T_e = T_i$, i.e. Gleichheit zwischen Elektronen- und Ionentemperatur. Für die TT-Quelle gilt die Annahme eines monoenergetischen D-Ionenstrahls, welcher initial, senkrecht auf die erste Wand trifft. Der Referenzpunkt liegt bei CELLSOR an der *oberen Mittelebene* im Hauptraum der Brennkammer, i.e. poloidal gesehen mittig an der ersten Wandoberfläche auf der NFS.

Der Quellfluss, in den hiesigen MC-Rechnungen der Recyclingfluss, entspricht im hier betrachteten Fall vollständiger Wandsättigung ($r_{rec} = 1$) dem initial auftreffenden Ionenfluss.

Der Ionenfluss wurde im DEMO-Testfall um eine Größenordnung stärker vorgegeben, als im ITER-Testfall, damit sich die Neutralgasprofile nicht überlagern, d.h. in der Auswertung die Option gemeinsamer grafischer Abbildung böten.⁴

5.1.3. Vergleich des Atomdichteprofiles

Fehlerhafte Lösungen der kinetischen Gleichungen in CELLSOR sollten sich im Vergleich der radialen Neutralgasdichte des D-T-Brennstoffs offenbaren. Der radiale Dichteverlauf wird direkt von den Ionisationsprozessen mit dem Elektronenhintergrund sowie den CX-Stößen mit dem Ionenhintergrund bestimmt. Zweitere bestimmen die Kinetik der neutralen TT, da Häufigkeit und Position von CX-Stößen die Energie- und Winkelverteilung der TT festlegen und damit wiederum deren Reaktionswegstrecken.

Die Dissoziationsverhältnisse bestimmen analog nur für den molekularen Anteil der recycelten TT die Energieverteilung und dadurch wiederum die Weglängen für CX und Ionisation dicht vor der Wand. Im ITER- sowie DEMO-Testfall teilte sich der Quellfluss jeweils in 76 – 78 % reflektierte Atome sowie 22 – 24 % desorbierende Moleküle auf.

Für einen quantitativen Vergleich werden die liniengemittelten Dichten beider Codes verglichen, d.h. für die diskreten Zellpositionen r_i zu

$$\bar{n}_n \approx \frac{\sum_i n_n(r_i) r_i \Delta r_i}{\sum_i r_i \Delta r_i} \quad (5.1)$$

berechnet.

Die Abbildungen 5.1.3 und 5.2 zeigen den radialen Neutraldichteverlauf der Vergleichsrechnungen zwischen CELLSOR und EIRENE im DEMO-Testfall. Abb. 5.2 zeigt jeweils den Verlauf im SOL, welcher für die konsistente Berechnung der Teilchenbilanz innerhalb dieser Zone von Relevanz ist, da die volumetrische Quellstärke durch Ionisation aus der Neutralteilchendichte folgt.

Abb. 5.1.3 und 5.4 zeigen analog den radialen Neutraldichteverlauf der Vergleichsrechnungen zwischen CELLSOR und EIRENE im ITER-Testfall.

Im ITER-Testfall fällt auf, dass die Dichte innerhalb weniger Zentimeter vor der Wand (bei $r = 0$) zunächst ansteigt, während diese im DEMO-Testfall stetig in Richtung Plasmazentrum abnimmt.

Ursache sind die - relativ zum DEMO-Fall - niedrigeren Ionenenergien des initialen Quellflusses sowie teilweise die niedrigere Wand- und Plasmatemperatur; zweitere im äußeren SOL, wodurch die mittleren Eindringtiefen bis zur Dissoziation der desorbierenden Brennstoffmoleküle erhöht wurden. Dadurch - und aufgrund der niedrigeren Plasmatemperatur - sind die mittleren Eindringtiefen der Ionisation erhöht.

Ionisation führt prinzipiell lokal zum Dichteabfall der Neutralen, da dabei Neutralgas dem Ionenhintergrund zugeführt wird. Bei schwacher Ionisation, welche aufgrund obiger Effekte im ITER-Fall dicht vor der Wand vorherrscht, steigt die Dichte aufgrund der Flussflächengeometrie. Für eine Quellstärke, i.e. Wandrecycling-Brennstoffneutralteilchen pro Fläche und Zeit, werden beim Zelldurchgang in Richtung Plasmamitte verkleinerte Flussflächen durchströmt.

⁴CELLSOR gestattet den Fluss in einer konsistenten Rechnung aus den vorgegebenen Transportparametern v_{\perp} , D_{\perp} und τ_{\parallel} durch Lösung der Kontinuitätsgleichung zu berechnen (Kap. 4.5). Dies kann EIRENE im Falle einer Kopplung an einen Fluidcode wie B2 oder EDGE-2D. Für die Benchmark-Läufe wurde aufgrund der isolierten Verfügbarkeit von EIRENE eine Abfalllänge λ_n der Ionendichte im SOL sowie ein willkürlicher Wandfluss Γ_{D+} vorgegeben.

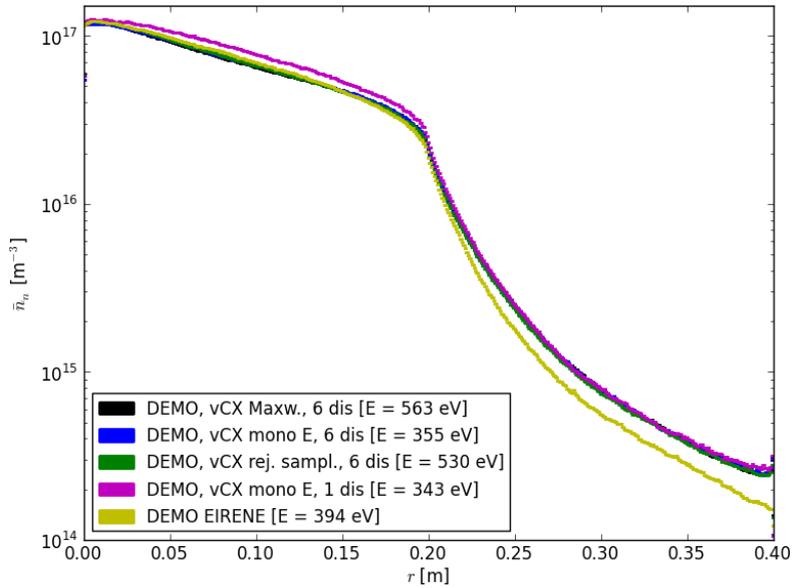


Abbildung 5.2.: Histogramme der berechneten radialen D-T-Neutralgasdichte des DEMO-Testfalls; CELLSOR: schwarz, grün, blau und magenta, EIRENE: gelb; $r = 0$ m: erste Wand, $r = 0,4$ m: Pedestal-Spitze.

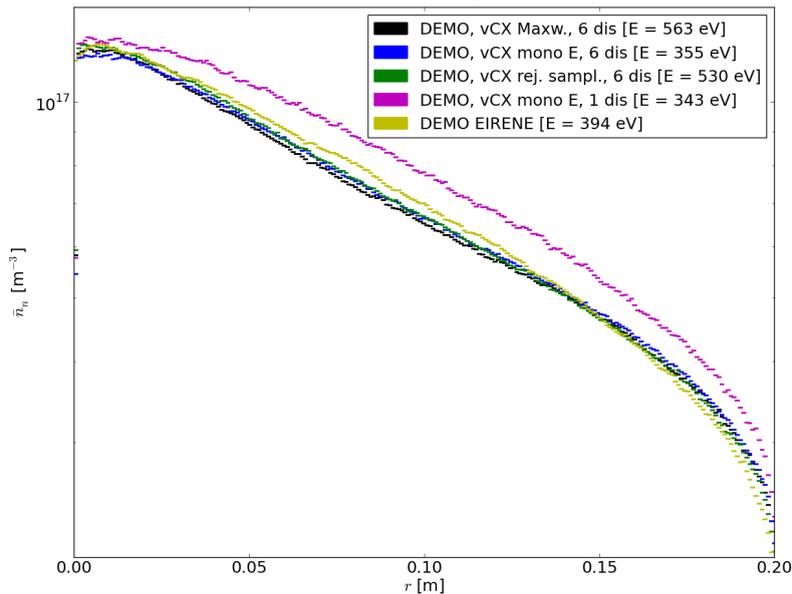


Abbildung 5.3.: Histogramme der berechneten radialen D-T-Neutralgasdichte des DEMO-Testfalls im SOL ($\Delta_{SOL} = 0,2$ m), CELLSOR: schwarz, grün, blau und magenta, EIRENE: gelb; $r = 0$ m: erste Wand.

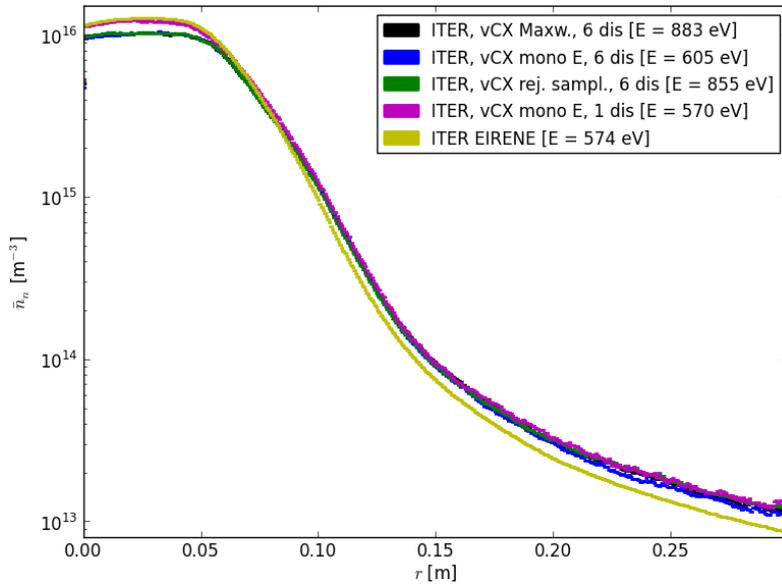


Abbildung 5.4.: Histogramme der berechneten radialen D-T-Neutrgasdichte des ITER-Testfalls; CELLSOR: schwarz, grün, blau und magenta, EIRENE: gelb; $r = 0$ m: erste Wand, $r = 0,3$ m: Pedestal-Spitze.

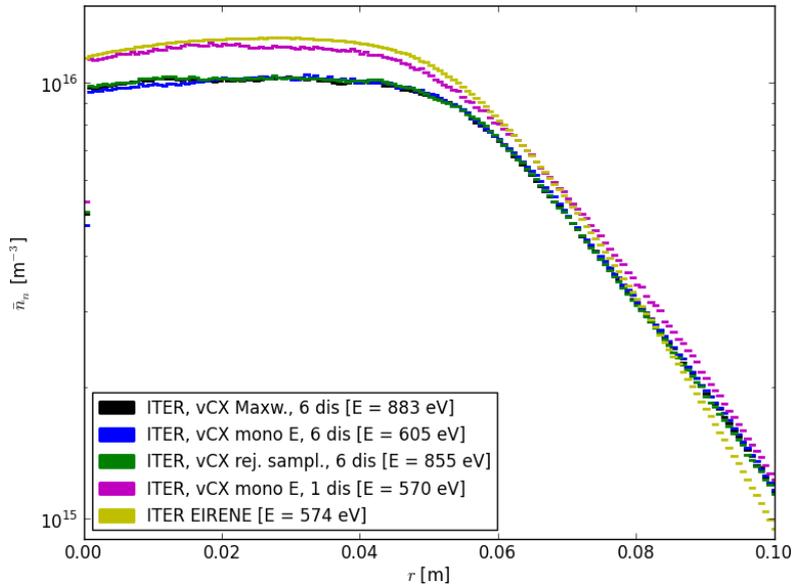


Abbildung 5.5.: Histogramme der berechneten radialen D-T-Neutrgasdichte des ITER-Testfalls im SOL ($\Delta_{SOL} = 0,1$ m); CELLSOR: schwarz, grün, blau und magenta, EIRENE: gelb; $r = 0$ m: erste Wand.

Dadurch würde beispielsweise im Falle konstanter Flächenflussdichte, d.h. ohne Verlustprozess (Ionisation), die Neutralgasdichte stetig zum Plasmazentrum hin anwachsen.

Im DEMO-Testfall ist zu beobachten, dass der Dichteverlauf im SOL (Abb. 5.2) in den mit CELLSOR gerechneten Fällen kaum von der Wahl der Methode zur Generierung der Geschwindigkeiten nach CX-Stößen abhängt. Bei den mittleren (Aufprall-)Energien der Neutralen, welche die erste Wand erreichen, kam es allerdings zu stärkeren Abweichungen. Die Ursache dafür liegt darin begründet, dass der monoenergetische Fall der mittleren Energie einer MBV entspricht, d.h. im Grenzwert grosser Teilchenensemble zu keiner Abweichung der mittleren Ionisationswegstrecken führt. Anders verhält es sich bei der Energieverteilung beim Wandaufprall, da schnelle Teilchen diese, auf Grund der erhöhten Opazität des SOL, bevorzugt erreichen.

Tabelle 5.2.: Liniengemittelte Dichte \bar{n}_n im ITER- sowie DEMO-Testfall, gerechnet mit EIRENE und CELLSOR für verschiedene Methoden zur Generierung von \vec{v} nach CX-Stößen; v mono: mono-energetisch bei $\bar{E} = 1,5k_B T_i(\rho)$, v MBV: MBV für \vec{v} , v rej.: *Rejection-Sampling* nach Cupini *et al.*, [29] 1 dis / 6 dis: Dissoziation mit 1 / 6 Reaktionskanälen.

	CELLSOR				EIRENE
	1 dis	6 dis			6 dis
	v mono	v MBV	v mono	v rej.	v mono
ITER \bar{n}_n [10^{14} m^{-3}]	8,07	7,01	7,04	7,01	8,21
ITER SOL \bar{n}_n [10^{15} m^{-3}]	8,42	7,31	7,32	7,35	8,66
ITER \bar{E}_{wall} [eV]	570	883	605	855	574
DEMO \bar{n}_n [10^{16} m^{-3}]	1,12	0,99	0,99	1,00	1,01
DEMO SOL \bar{n}_n [10^{16} m^{-3}]	7,98	7,02	7,09	7,14	7,29
DEMO \bar{E}_{wall} [eV]	343	563	355	530	394

Tab. 5.2 zeigt, dass die mittleren Aufprallenergien beim Vergleich von CELLSOR und EIRENE nur dann ähnlich waren, wenn auch bei CELLSOR die Geschwindigkeiten nach CX-Stößen monoenergetisch zugewiesen wurden. Im DEMO-Testfall errechnete EIRENE $\bar{E}_{wall} \approx 394$ eV und CELLSOR $\bar{E}_{wall} = 355 \pm 35,5$ eV, was einer auf EIRENE normierten relativen Abweichung von 9,1 % entspricht. Im ITER-Testfall errechnete EIRENE $\bar{E}_{wall} \approx 574$ eV und CELLSOR $\bar{E}_{wall} = 570 \pm 57$ eV, was einer auf EIRENE normierten relativen Abweichung von 0,7 % entspricht.

Weiterhin zeigen die Rechnungen, bei denen die beiden Verteilungen (MBV / Cupini *et al.*) verwendet wurden, dass die monoenergetische Näherung zum Unterschätzen der Aufprallenergien auf die erste Wand führt. Da die Erosion der Wand die zentrale Fragestellung darstellt, folgt hier der Schluss, dass die *Verwerfungsmethode* nach Cupini *et al.* anzuwenden ist; die Verwendung der unmodifizierten MBV führte dagegen zu kleineren Abweichungen zu den *korrekten* mittleren Energien von 3 – 6 %.⁵

Die EIRENE Rechnungen im ITER- sowie DEMO-Testfall entstanden innerhalb eines Zeitraums von 3 Monaten. Dabei wurden stets die Parameter aus Tab. 5.1 verwendet; EIRENE wurde jedoch nicht immer mit identischen Einstellungen aufgerufen. Die Verläufe der Dichte im SOL, i.e. Abb. 5.2 und 5.4 zeigen, dass im DEMO-Fall mit dem komplexen Standardmodul für Molekül-Plasma-Interaktionen gerechnet wurde, i.e. mit den 6 Dissoziationskanälen der Gleichungen 4.22 - 4.29, während im ITER-Testfall mit der simpleren Einstellung, i.e. lediglich mit einem Kanal für Dissoziation (Gl. 4.22) sowie für molekulare Ionisation (Gl. 4.23) gerechnet wurde.

⁵Diese Annahme erscheint sinnvoll, falls beschleunigte Rechnungen benötigt werden, etwa bei iterativer Kopplung an Fluidbilanzgleichungen.

Die Übereinstimmung der liniengemittelten Dichte lag im SOL des DEMO Testfalls bei 2, 7% und beim ITER-Testfall bei 2, 8%. Generell stieg die Streuung der Histogramme zum Plasmazentrum hin stark an, da aufgrund der starken Ionisation in der Randschicht nur etwa $10^{-4} - 10^{-5}$ der gestarteten Testteilchen in Plasmazonen jenseits des Randschichtpedestals einwärts vordrangen; eine gute Übereinstimmung lag dagegen zwischen $r = 0$ m und $r = 0, 2$ m (ITER) bzw. $r = 0, 55$ m (DEMO) vor.

Für die Modellierung der Erosion der ersten Wand, also für die Energie- und Winkelverteilung der Neutralen sowie für den Ionisationsterm der Kontinuitätsgleichung liegt die wichtige bzw. relevante Zone im SOL, i.e. bis zu $r = 0, 1$ m (ITER) bzw. $r = 0, 2$ m (DEMO). In dieser relevanten Zone ist sowohl die statistische Streuung, als auch der Verlauf der Dichtehistogramme von hoher Güte und Übereinstimmung.

Weiterhin zeigen die Dichteverläufe, dass die Ionisation bei CELLSOR im Vergleich zu EIRENE von der Pedestalmittle einwärts abgeschwächt war. Dies äußert sich im flacheren Abfall der Neutralteilchendichte in Richtung Plasmazentrum. Die Unterschiede könnten darin begründet sein, dass CELLSOR mit Vektoren im 3-d Torus rechnet, während EIRENE in einer Kreisgeometrie rechnet, d.h. ohne toroidale Krümmung. Die toroidale Krümmung führt jedoch verstärkt dazu, dass stark toroidal orientierte Teilchen mit kleiner radialen Geschwindigkeitskomponente zur Wand, in die Lage versetzt werden wandnähere Flussflächen durchkreuzen können, wodurch der beobachtete Dichteabfall (zur Wand) geringfügig abgeschwächt wird.

5.2. Plausibilitätskontrolle: Energie- und Winkelverteilung beim Wandaufprall

Neben dem Vergleich mit gerechneten Daten des etablierten Codes EIRENE wurde die mit CELLSOR ermittelte Energie- und Winkelverteilung auf Plausibilität untersucht.

5.2.1. Winkelverteilung

Abb. 5.6 zeigt das unnormierte Histogramm aller Winkel von auf die Wand treffenden Deuterium-Neutralteilchen, gerechnet im ITER-Testfall. Die Verteilung *peakt* bei $\theta \approx 55 - 60^\circ$ und ist nicht symmetrisch, d.h. große Winkel von $\theta = 80 - 90^\circ$ sind gegenüber kleineren Winkeln von $\theta = 0 - 10^\circ$ deutlich unterdrückt. Das erscheint absolut plausibel, da ein Winkel von $\theta = 90^\circ$ einem parallelen tangentialen Wandeinfall entspräche.⁶

Der senkrechte Wandeinfall, i.e. $\theta = 0^\circ$, ist dagegen deutlich wahrscheinlicher, da ein Teilchen nach einem CX-Stoß dicht vor der Wand eine isotrope Richtungsänderung erfährt, sodass aufgrund der Wandkrümmung gleich mehrere Stellen senkrechten Einfall ermöglichen; einerseits die direkte senkrechte Verbindung in radialer Richtung sowie leicht geneigte Flugbahnen, bei denen die Neigung in toroidaler bzw. poloidaler Richtung exakt die Krümmung der Torusoberfläche aufwiegt. Die Asymmetrie der generierten Winkelverteilung erscheint daher absolut plausibel.

5.2.2. Energieverteilung

Für die Energieverteilung sollte erfahrungsgemäß ein Verlauf, welcher dem Neutraldichteverlauf aus Abb. 5.2 folgt, erwartet werden.

⁶Theoretisch wäre dies möglich wenn ein Teilchen, welches vor der Wand im äußeren SOL nach einem CX-Stoß hauptsächlich toroidal und geringfügig radial nach innen gerichtet durch den Torus flöge, sodass es an der inneren Wandseite tangential aufträfe. Allerdings wäre während so einer Reise die Wahrscheinlichkeit einer erneuten Richtungsänderung durch einen weiteren CX-Stoß sehr hoch.

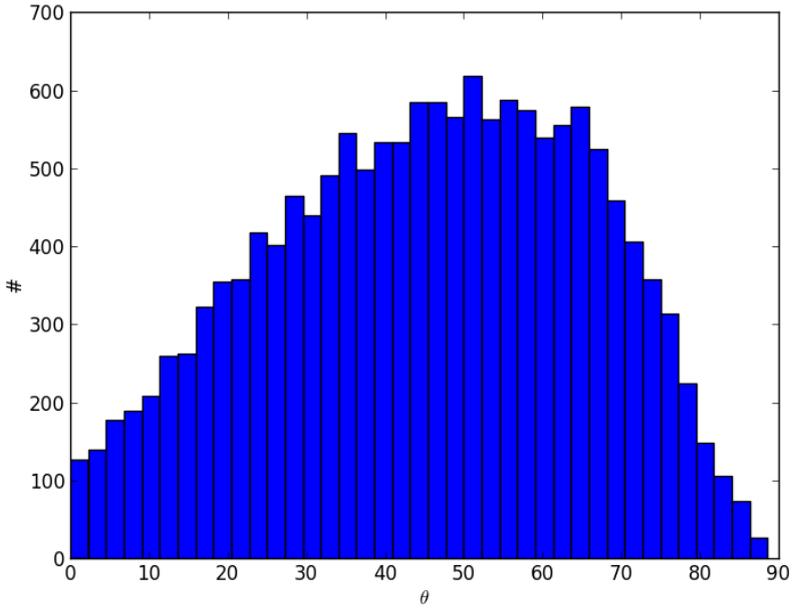


Abbildung 5.6.: Unnormiertes Histogramm der Winkelverteilung von mit CELLSOR gerechneten D-Neutralteilchen beim Wandaufprall im ITER-Testfall; θ entspricht dabei dem Winkel zwischen einfallendem Teilchen und der zum Plasma zeigenden Oberflächennormalen der ersten Wand.

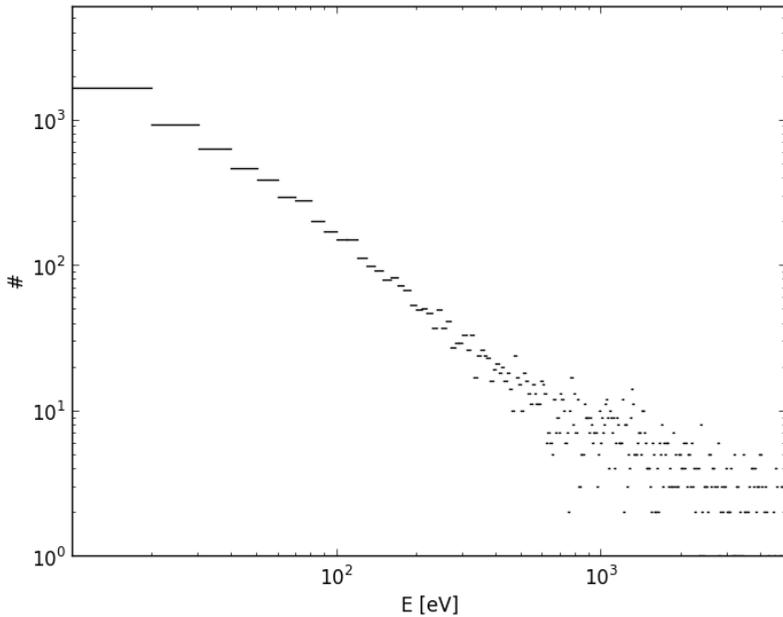


Abbildung 5.7.: Histogramm der Energieverteilung der auf die Wand auftreffenden D-Neutralteilchen im ITER-Testfall in doppelt-logarithmischer Darstellung; gerechnet mit CELLSOR.

Der radiale Neutraldichteverlauf gibt die Verteilung der Eindringtiefen in Richtung Zentralplasma an. Erwartungsgemäß dringen nur wenige Teilchen tiefer ins Plasma ein. Gleichzeitig ist das Plasma vor der Wand kalt (wenige eV) und nahe der Separatrix sowie ab dem Randschichtpedestal einwärts sehr heiß (einige 100 bis 1000 eV). Demnach sollte die große Mehrheit der (finalen) CX-Stöße im kälteren Plasma erfolgen, bei dem der Gradient sehr klein ist, d.h. bei dem über eine Strecke von einigen Zentimetern eine niedrige Temperatur vorherrscht. Da die Energie eines Testteilchens nach einem CX-Stoß von eben dieser Plasmatemperatur der Ionen bestimmt wird, wird ein deutlicher Peak der Energieverteilung bei sehr kleinen Energien erwartet. Da die Temperaturgradienten im Pedestal sehr groß sind, dort allerdings auch das Neutraldichteprofil stark abfällt (da die Ionisationsrate mit steigender Temperatur anwächst), werden wenige Teilchen mit hohen Energien erwartet, allerdings wird erwartet, dass es keinen Cutoff gibt, d.h. dass die Verteilung stetig bis zu sehr hohen Energien abfällt, vorraussichtlich exponentiell.

Abb. 5.7 zeigt die tatsächliche mit CELLSOR gerechnete Energieverteilung der auf die Wand auftreffenden Deuterium-Neutralteilchen im ITER-Testfall in doppelt-logarithmischer Darstellung. Wie erwartet entspräche der Verlauf des Histogramms einer von kleinen zu hohen Energien monoton und stetig abfallenden Verteilungsfunktion. Dabei liegt der Anteil an Teilchen, welche mit Energien oberhalb von einem keV auf die Wand treffen, im Prozentbereich. Erwartungsgemäß deckt sich diese Beobachtung mit dem Anteil an Teilchen, welche nach Abb. 5.1.3, von der Wand aus gesehen, in Plasmatiefen jenseits der Separatrix vordringen. Die Energieverteilung erscheint daher absolut plausibel.

5.3. Zusammenfassung und Fazit

Die Vergleichsrechnungen mit EIRENE führen zu dem Fazit, dass CELLSOR - im Rahmen der getätigten Annahmen - ein geeignetes Werkzeug zur Berechnung der Erosion der ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer darstellt. An dieser Stelle seien nochmal einige wesentliche Erkenntnisse zusammengefasst:

1. Der Vergleich mit äquivalenten EIRENE-Rechnungen zeigte eine starke Übereinstimmung beim gerechneten Verlauf der liniengemittelten Neutralteilchendichte.
 - Insbesondere im relevanten Bereich des SOL lag die relative Abweichung - bezogen auf die EIRENE Ergebnisse - innerhalb des statistischen Rechenfehlers bei 2,7 % (DEMO) bzw. 2,8 % (ITER).
 - Weiterhin zeigten die Benchmark-Rechnungen im ITER-Fall, dass die Modellannahmen der Dissoziation den Dichteverlauf der neutralen Atome innerhalb des SOL stark beeinflussten. Unter Verwendung des simplen Dissoziationsmodells (2 Reaktionskanäle) wurde im Vergleich zum komplexeren (6 Reaktionskanäle) die SOL-Dichte um 13 % unterschätzt.
2. Der Vergleich der mittleren Energien der Neutralen beim Wandaufprall zeigte:
 - im Falle monoenergetischer Zuweisung von Energien (auf den Mittelwert einer MBV) nach CX-Stößen - wie bei den EIRENE-Rechnungen -, dass die Energieverteilung von auf die Wand prallenden Neutralen, bei den CELLSOR-Rechnungen, im Vergleich zu den EIRENE-Rechnungen, zu niedrigeren Energien verschoben war, im Mittel um -9,1 % (DEMO) bzw. -0,7 % (ITER). Dies lag innerhalb der statistischen Fehler der durchgeführten CELLSOR-Rechnungen, i.e. $\Delta E = \pm 10\%$.

- unter Zuweisungen einer modifizierten MBV, generiert durch eine *Verwerfungsmethode* nach Cupini *et al.*, dass die Energien unter realistischeren Annahmen um 35 % (DEMO) bzw. 49 % (ITER) höher ausfallen, als im monoenergetischen Benchmark-Fall.
- Verwendet man zur Beschleunigung des Codes die unmodifizierte MBV, so liegt die Abweichung zur *echten* Energieverteilung (*Verwerfungsmethode* nach Cupini *et al.*) bei 3 – 6 %.⁷
 - Abseits dieser Benchmark-Läufe sollte CELLSOR stets so aufgerufen werden, dass Geschwindigkeiten nach CX-Stößen aus einer MBV oder der präziseren Verteilung (nach Cupini *et al.*) generiert werden.

3. Sowohl die Energie- als auch die Winkelverteilung der gerechneten Deuterium-Neutralen beim Wandaufprall hielten einer qualitativen *Plausibilitätsprüfung* stand.⁸

Insgesamt zeigte der Vergleich zwischen CELLSOR- und EIRENE-Rechnungen eine starke Übereinstimmung, i.e. innerhalb des *statistischen Fehlers* von $\Delta E, \Delta \bar{n}_{SOL} = \pm 10\%$ der CELLSOR-Rechnungen abweichende Ergebnisse, insbesondere der liniengemittelten Dichte im SOL sowie der Energien von Neutralen beim Wandaufprall; für Fälle identischer Annahmen, i.e. unter monoenergetische Energiezuweisung nach CX-Stößen sowie für einen modellierten Dissoziationskanal.

Insgesamt wird eine erfolgreiche Verifikation des MC-Codes CELLSOR geschlussfolgert; die erfolgreiche Implementierung der *Verwerfungsmethode* nach Cupini *et al.* wurde als wichtiges Element separat verifiziert.

Der Vergleich offenbarte zudem die quantitative Sensitivität der Ergebnisse zu den Modellannahmen. Die Benchmark-Rechnungen führten im Vergleich zu erweiterten Annahmen, i.e. unter Verwendung einer *exakten Energieverteilung* nach CX-Stößen nach Cupini *et al.* sowie 6 modellierten Dissoziationskanälen, zu signifikanten Abweichungen der Dichte im SOL bzw. der Energieverteilung der Neutralen beim Wandaufprall.

Dies hat für die globalen Erosionsstudien (Kap. 6) zur Konsequenz, dass CELLSOR unter Verwendung des komplexen Dissoziationsmoduls sowie unter Verwendung der *Verwerfungsmethode* nach Cupini *et al.*, zur Bestimmung der Energien von Neutralen nach CX-Stößen, verwendet wurde.

⁷Eine solche Näherung kann also - je nach erforderlichem Detailgrad einer Rechnung - akzeptiert werden.

⁸Ein Vergleich der ermittelten ZA war im Rahmen dieser Rechnungen nicht sinnvoll. EIRENE rechnete - aus Rechenzeitgründen - den Fall eines poloidalen Kreisquerschnitts anstelle eines gesamten Torus, sodass die Winkelverteilung der Teilchen gegenüber CELLSOR (Abb. 5.6) deutlich zu kleineren Winkeln hin verschoben wurde. Da ZA stark winkelabhängig sind, wäre der Vergleich hier nicht aussagekräftig gewesen. Es sei gesagt, dass der Wechsel von Torus- (3-d) zu Kreisgeometrie (2-d) auf das radiale Neutraldichteprofil kaum einen Einfluss hat. Dieser Vergleich stand zum Zeitpunkt der Vergleichsrechnungen jedoch im Fokus. Die Rechenzeit war wichtig, da diese Läufe im Zuge des Benchmarks über mehrere Monate immer wieder gestartet werden mussten.

Kapitel 6.

PWW-Studien für den Hauptraum der Brennkammer

In diesem Kap. werden die wesentlichen Ergebnisse der mit dem CELLSOR und CELLSOR ERO durchgeführten Studien diskutiert. Dabei steht die Abschätzung der mittleren primären globalen Nettoerosion im Hauptraum der Brennkammer von DEMO1 (*Baseline-Parameter*, Kap. 3.5) im Fokus. Diese wird durch PWW verursacht und für unterschiedliche Parameter der Plasmarandschicht untersucht.

Das Primärziel der in diesem Kap. diskutierten Studien besteht darin, die Rolle der Plasmamaparameter des *Pedestals* und des SOL für die *Zerstäubung* der ersten Wand zu studieren.

Das Sekundärziel ist das Auffinden von Parameterwerten innerhalb derer die Lebensdauer der ersten Wand von DEMO1, welche durch Erosion aufgrund der PWW begrenzt wird, einen möglichst stetigen Plasmabetrieb bis zu den vorgesehenen Austauschzeitpunkten des Reaktor-Blankets erlaubt.

6.1. Kriterium zur Bestimmung der Wandlebensdauer

Als Kriterium gilt:¹ die Lebensdauer aufgrund der Erosion der ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer, welche durch PWW begrenzt wird, darf nicht die von Romanelli *et al.* in der EFDA-Roadmap zur Realisierung von Fusionsstrom[127] aufgrund von Neutronenschäden vorgesehenen Austauschintervalle für das Starter- und Nachfolgeblanket von DEMO1 unterschreiten, i.e. eine Erosion von $\leq 10\%$ der obersten Wolframschicht innerhalb von 2 (Starter-) bzw. 5 (Nachfolgeblanket) Vollbetriebsjahren (fpy).²

6.2. Elementare Randschichtparameter

Als *elementare Randschichtparameter* wurden dazu vorab identifiziert:

1. Die Dichte- (n_{ped}) sowie die Temperatur (T_{ped}) des *Pedestals*,
2. der Transportmechanismus: Diffusion (D_{\perp}), Konvektion (v_{\perp}); die Stärke der Teilchenabfuhr zum Divertor (τ_{\parallel}): abhängig von Plasmatemperatur im SOL (\bar{T}_{SOL}),³
3. sowie der über die magnetische Konfiguration eingestellte *Wandabstand*⁴ (Δ_{SOL}).

6.3. Mechanismen der Wandschädigung

Abb. 6.1 veranschaulicht die zu erwartenden schädigenden Teilchenspezies, zwischen denen im Rahmen der PWW im Folgenden bei der Diskussion der Ergebnisse unterschieden wird.

¹Die Definition einer *effektiven Wandlebensdauer* kann Kap. 3.4.4 entnommen werden.

²Ein Abtrag von $\leq 10\%$ einer 2 mm dicken W-Schicht entspricht einem Massenverlust von $\leq 3,9$ t, i.e. einer Abtragsrate von $\leq 1,95$ t pro fpy beim Starterblanket ($\leq 5,3$ kg pro Betriebstag) bzw. ≤ 780 kg pro fpy beim Nachfolgeblanket ($\leq 2,1$ kg pro Betriebstag).

³Aufgrund der Beschaffenheit der analytischen Lösung der *Kontinuitätsgleichung* (Kap. 4.5.1), bei der der temperaturabhängige Parameter τ_{\parallel} eine Konstante in der radialen Koordinate ρ ist, gilt als wesentlicher Parameter hier die über ρ gemittelte Temperatur, i.e. $\bar{T}_{SOL} = \int_{\Delta_{SOL}} d\rho T(\rho)$. In den MC-Rechnungen wurde zur Bestimmung der Interaktion zwischen TT und Hintergrundplasma die vorgegebene Profilform $T(\rho)$ verwendet.

⁴Dabei handelt es sich um den entlang der z -Koordinate gemittelten *Wandabstand* der Separatrix.

1. Schädigung durch auf die Wand strömende und in der Schicht beschleunigte Ionen (D, T, He, *Seeding-Gas-Spezies*, W),
2. Schädigung durch **Rec.-CXn**: durch in heißen Plasmazonen durch CX-Stöße freigesetzte Brennstoff-Neutralteilchen, welche ursprünglich durch das *Wandrecycling* von außen ins Plasma gelangten,
3. Schädigung durch **Pel.-CXn**: durch in heißen Plasmazonen durch CX-Stöße freigesetzte Brennstoff-Neutralteilchen, welche ursprünglich durch die *externe Brennstoffzufuhr* (hier: Pelletinjektion) von außen ins Plasma gelangten.

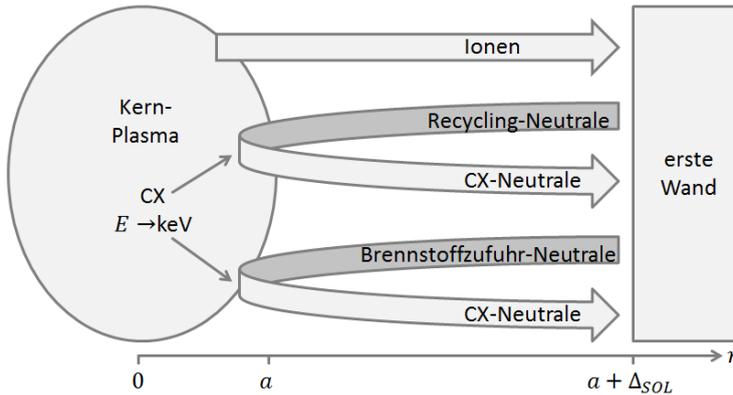


Abbildung 6.1.: Schematische Darstellung potenziell schädigender Teilchenspezies, welche auf die erste Wand im Hauptraum der Brennkammer strömen bzw. fliegen, i.e. Ionen sowie Rec.-CXn und Pel.-CXn.

6.4. Externe Brennstoffzufuhr durch Gaseinlass bzw. Pellet-Injektion

Zunächst wird die Methode der *externen Brennstoffzufuhr* (Fuelling) verglichen, i.e. durch Gaszufuhr bzw. durch Injektion gefrorener Pellets; exemplarisch am Beispiel des Niedrigdichtefalls (Tab. 6.1) mit diffusivem Transport senkrecht zu den magn. Feldlinien im SOL.⁵

Die Transportparameter D_{\perp} und v_{\perp} wurden für die unterschiedlichen Testfälle (Tab. 6.1) so gewählt, dass möglichst äquivalente *Gesamtteilchenflüsse* im Kernplasma sowie im SOL resultierten. Die daraus abgeschätzte Heliumkonzentration im Kernplasma lag bei $c_{He} \approx 1\%$.⁶ Abb. 6.2 zeigt das mit CELLSOR errechnete Profil an atomaren Brennstoffneutralen. Dabei ist der tiefere Brennstoffeintrag, im Vergleich zur Brennstoffzufuhr durch Gaseinlass (Maximum im SOL bei einem Wandabstand von $\rho = 14 - 16$ cm) für das Pellet-Injektorsystem (Maximum bei einem Wandabstand von $\rho = 33 - 36$ cm) klar zu sehen.⁷

⁵In Kap. 4.2.4 wird die CELLSOR-Modellierung der Fuelling-Systeme behandelt.

⁶Der zugrunde liegende Rechenweg wird in Kap. 4.6.1 beschrieben.

⁷Abb. A.1 zeigt das entsprechende radiale Profil der *Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion* (pdf) der Brennstoffionisation.

Beim Gaszufuhrsystem resultierte aus der hohen Ionisationsrate von Neutralteilchen im SOL - verglichen mit dem Pellet-Injektions-System - ein 2,8-fach erhöhter, benötigter wandseitiger Brennstoffzufluss Γ_{ext} .⁸

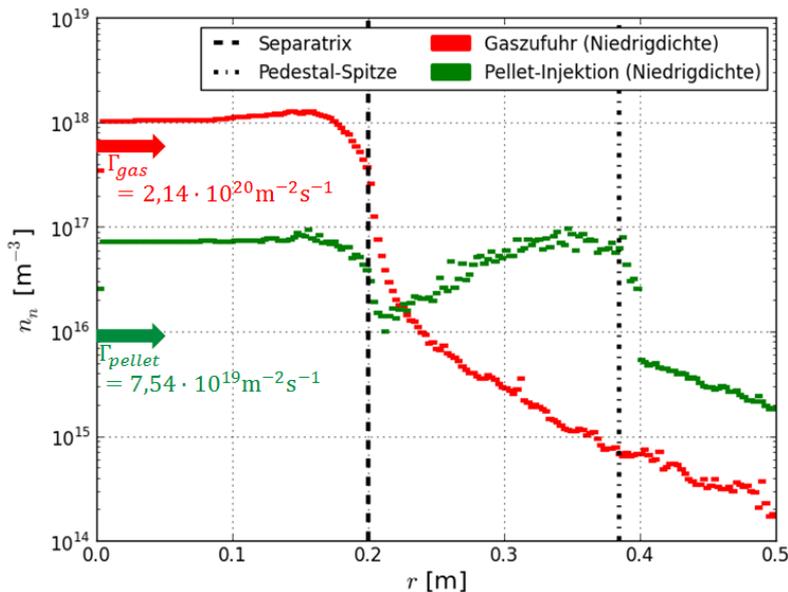


Abbildung 6.2.: Vergleich der mit CELLSOR für DEMO1 gerechneten atomaren Brennstoffdichte für ein Pellet-Injektorsystem ($v_{pel} = 1000$ m/s, $\nu_{pel} = 20$ Hz) sowie ein Gaszufuhrsystem (Austrittstemperatur: $T_{gv} = 600$ K) im NDF (Diffusion, kalter SOL, $c_{He} \approx 1\%$); Breite des SOL: $\Delta_{SOL} = 20$ cm. Der Sprung bei $r = 0,4$ m wird durch die Unstetigkeit im Ablationsprofil am Ort der vollständigen Pelletablation verursacht (Abb. B.3).

Der benötigte Brennstoffzufluss folgte aus der Brennstoff-Ionisationsrate des Kernplasmas zu: $\Phi_{iz} \approx 7,1 \cdot 10^{22} \text{ s}^{-1}$. Die Ionisationsrate ergab sich aus der vorgegebenen Leistung bzw. Heliumkonzentration des Kernplasmas, i.e. aus $P_{Fus} = 2$ GW bzw. $c_{He} \approx 1\%$.

Der wandseitig in die Brennkammer eingetragene Brennstoff wurde

- im Falle der **Gaszufuhr** zu 33,6 % im Kernplasma ionisiert,
- im Falle der **Pellet-Injektion**, aufgrund der vorwiegend im Pedestal stattfindenden Ablation, zu 95,5 % im Kernplasma ionisiert.⁹

6.4.1. In der Randschicht abgepumpter Tritium-Beipass

Abb. 6.3 zeigt eine schematische Darstellung (in der Poloidalebene) der Teilchenflüsse in der Plasmarandschicht.

⁸Die Berechnung von Γ_{ext} wird in Kap. 4.6.2 behandelt.

⁹Ablationskurven für verschiedene Parameter des Pellet-Injektors sind in Abb. B.3 dargestellt.

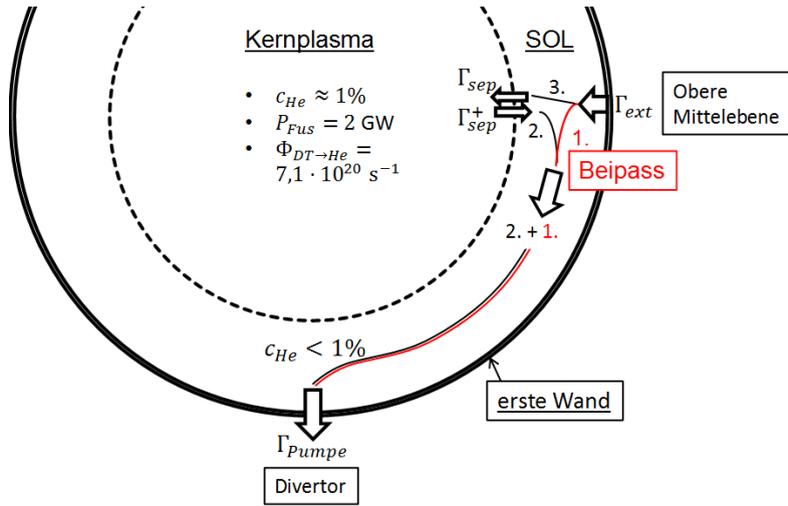


Abbildung 6.3.: Schematische Darstellung der Teilchenflüsse in der Plasmarandschicht; Ausschnitt der Poloidalebene¹⁰. Der externe Brennstoffzufluss Γ_{ext} wird entweder durch ein Gasventil oder durch einen Injektor für gefrorene, kugelförmige Brennstoffpellets erzeugt.

Der wandseitige Zufluss an Brennstoffneutralen betrug

- im **Pellet-Injektionsfall**: $\Gamma_{ext} = 7,54 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$,
- und im **Gaszufuhrfall**: $\Gamma_{ext} = 2,14 \cdot 10^{20} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$.

Der aus dem Kernplasma in den SOL strömende Ionenfluss Γ_{sep}^+ (2. in Abb. 6.3) war zwar für beide Fuelling-Systeme identisch, der *Beipass*-Anteil (1. in Abb. 6.3), i.e. der Anteil des wandseitig startenden und im SOL statt im Kernplasma ionisierten sowie anschließend zum Divertor abgeführten, abgepumpten Brennstoffs, war im Falle des Gaseinlasses um das 41,8-fache erhöht.¹¹

6.4.2. Auswirkungen auf die TBR

Von der Verarbeitung der Plasmaabfuhr (*Plasma Exhaust Processing*) wird das abgepumpte Material in eine Reinigungs und Isotopen-Separationseinheit (*Fuel Cleanup and Isotope Separation*) geleitet.

Das separierte Tritium wird anschließend durch einen Speicher (*Storage*) über das System der Brennstoffzufuhr wieder der Brennkammer zugeführt.

¹⁰Der poloidale Querschnitt zeigt in Divertor-Tokamaks typischerweise vertikal elongierte, ellipsoide Flussflächen (Abb. 6.3); jene wird zur Vereinfachung als kreisrund dargestellt.

¹¹Der erhöhte *Beipass*-Abfluss ist im Falle der Gaszufuhr auf die geringere Opazität (Def. in Kap. 3.2.6) des SOL-Plasmas zurückzuführen, welche durch die Stoßraten von Atomen mit Elektronen (Ionisation) bzw. Ionen (CX) bestimmt wurde; Kap. 4.2.2 beinhaltet eine Darstellung der mit CELLSOR modellierten *Atom-Plasma-Wechselwirkungen*. Im Falle der Pelletinjektion wurde die Opazität des SOL durch die Rate an durch *Reibung induzierter Ablation* festgelegt, welche eine deutlich schwächere Dichteabhängigkeit zeigte; Ablationsmodell in Kap. 4.2.4.

Die kumulierte mittlere Aufenthaltszeit des abgepumpten Tritiums in der gesamten *Tritiumanlage* beträgt gemäß Abdou *et al.* ca. 1,1 Tage.[1]

Im Brennstoffkreislauf führte der Wechsel von Pelletinjektion zu Gaszufuhr zu einem zusätzlichen *Beipass*-Durchsatz (1. in Abb. 6.3) in der Tritiumanlage von 31,1 kg T pro Durchlauf, i.e. dieser würde von 0,76 (Pellet-Injektion) auf 31,9 kg T pro Durchlauf (Gaszufuhr) erhöht.

- Bei der **Gaszufuhr** wurden als *Beipass* $1,34 \cdot 10^{23}$ Tritiumatome pro Sekunde abgepumpt (31,9 kg) und durch die *Tritiumanlage* geführt;
 - aufgrund des radioaktiven Zerfalls entsprach dies einem Massenverlust von etwa 5,4 g T pro Durchlauf, i.e. 1,44 kg T pro *Betriebsjahr*¹² (80 % Verfügbarkeit).
- Im Falle der **Pellet-Injektion** durchliefen 752 g T als zusätzlicher *Beipass* pro Zyklus die *Tritiumanlage*;
 - dies entsprach einem Zerfallsverlust in der *Tritiumanlage* von 128 mg T pro Durchlauf, i.e. < 34 g T pro *Betriebsjahr*.

Bei beiden Zufuhrsystemen war neben dem *Beipass*-Anteil (1. in Abb. 6.3) im abgepumpten Ionenfluss (Γ_{Pumpe}) noch der - in beiden Fällen identische - Fluss an Brennstoffionen (2. in Abb. 6.3), welche aus dem Kernplasma über die Separatrix strömten (Γ_{sep}^+), enthalten.¹³ Im Kontext der für den erfolgreichen Betrieb eines DEMO notwendigen TBR¹⁴ ($TBR \geq 1$) bedeutete dies eine Änderung von $\Delta_{TBR} \leq 1,6 \%$ (signifikant) für das Gaszufuhr-System und von $\Delta_{TBR} \leq 0,038 \%$ (vernachlässigbar) für das Pellet-Injektionssystem.¹⁵

6.4.3. Fazit

Das Gaszufuhrsystem wurde für ein DEMO1-Kraftwerk für ungeeignet befunden, aus Gründen der:

1. Plasmakontrolle: allein der radioaktive Zerfall des in die *Tritiumanlage* abgepumpten, erhöhten Tritium-*Beipasses* (1. in Abb. 6.3) würde die erforderliche TBR um $\Delta_{TBR} \leq 1,6\%$ erhöhen. Demnach würde weniger Oberflächenanteil der ersten Wand in der Brennkammer für Diagnostik-*Port Plugs* und Aktuatoren zur Verfügung stehen. Dies wäre aus Sicht der Plasmakontrolle bereits problematisch. Beim Pellet-Injektionssystem sind die Auswirkungen auf die erforderliche TBR mit $\Delta_{TBR} \leq 0,038 \%$ vernachlässigbar klein;
2. Lizenzierung: bereits die Betriebslizenz des *International Thermonuclear Experimental Reactor* (ITER) wurde daran geknüpft, dass die gesamte Maschinenanlage weniger als 1 kg mobilisierbares Gesamtinventar an T beinhalten darf.[68] Für DEMO1 ist davon auszugehen, dass eine Grenze innerhalb derselben Größenordnung vorgegeben wird. Der Tritium-*Beipass* im Falle der Gaszufuhr lag bei ≈ 32 kg T pro Durchlauf.¹⁶ Im Falle der *Pelletinjektion* lag der Massendurchsatz des *Beipasses* pro Durchlauf bei 752 g T;

¹²Ein *Betriebsjahr* entspricht beim *Baseline-Design* von DEMO1 (Kap. 3.5) einer Verfügbarkeit von 80%. Zwischen den Plasmapulsen, deren Pulsdauer 2 Stunden betragen soll, werden etwa 30 Minuten zum Evakuieren der Brennkammer sowie zum Umladen der Zentraltransformatorspule benötigt.

¹³Der aus dem Kernplasma in den SOL zurückströmende Brennstoffanteil ist eine Maschinenkonstante, i.e. dieser wird nicht durch *Fuelling*-System bestimmt. Daher wurde dieser Anteil nicht für den Vergleich beider Zufuhrsysteme herangezogen.

¹⁴Kap. 3.1.1 bietet eine Beschreibung der Brutreaktion $D+T \rightarrow n+{}^4\text{He}+17,6\text{MeV}$, welche im Reaktorblanket hinter der ersten Wand stattfindet. Eine Def. der TBR sowie eine Übersicht der europäischen Testblanket-Systeme für ITER folgen in Kap. 3.3.6.

¹⁵Der jährliche T-Bedarf eines DEMO mit einer Fusionsleistung von 2 GW beträgt ≈ 112 kg T (Anh. C.1).

¹⁶Auch bei einem 5%-Helium-Szenario (im Kernplasma), i.e. bei 4,54-fach reduziertem wandseitigen Brennstoff-zufluss Γ_{ext} , würden noch 7 kg T pro Durchlauf zusätzlich durch die *Tritiumanlage* geführt.

3. **Kosten:** die jährlich verfügbare und käuflich erwerbbar Tritiummenge ist aufgrund der geringen natürlichen Vorkommen sowie der begrenzten Produktion in mit Deuterium moderierten Kernspaltkraftwerken, auf wenige kg beschränkt. Die Kosten für 1 g T aus den kanadischen CANDU-Reaktoren wurden von Willms auf etwa 100k bis 200k USD geschätzt.[158] Der jährliche Verlustwert ΔW_v des radioaktiv in der Tritiumanlage zerfallenen Tritiums, welches bei der Gaszufuhr - gegenüber der Pelletinjektion - zusätzlich als *Beipass* abgepumpt würde, wäre: $\Delta W_v = 150 \text{ k USD} \cdot 1,76 \text{ kg} \approx 211 \text{ Mio. USD}$.

Abschließend sei noch ergänzt: für größere Wandabstände, i.e. $\Delta SOL > 20 \text{ cm}$, würde der Vergleich noch deutlicher zugunsten des Pellet-Injektionssystems ausfallen, da die Opazität des SOL für Gasatome deutlich stärker mit ΔSOL abnimmt, als für gefrorene Pelletkugeln.¹⁷ Im Folgenden wurden die PWW-Studien daher ausschließlich mit dem in CELLSOR integrierten Pellet-*Injektionsmodell* gerechnet und ausgewertet.

6.5. Auswahl der Randschichtparameter

Die Plasmaverhältnisse in der Randschicht werden

1. innerhalb der Separatrix durch die Güte des Energieeinschlusses und den in der H-Mode vorherrschenden Druck des Pedestals bestimmt, aus dem die Dichte (n_{ped}) sowie Temperatur (T_{ped}) an der Pedestalspitze folgen; die Dichte ist auf Grund einer empirisch entdeckten Plasma-Instabilität nach oben hin beschränkt (*Greenwald-Limit*: $n_{ped} \leq n_{GW}$);
2. an der Separatrix der oberen Mittelebene über die Temperatur- und Dichte im Divertor, die für das *Detachment* (Leistungsabfuhr) erfordert werden, bestimmt,
 - i.e. die Separatrixtemperatur (T_{sep}) folgt aus der vorgegebenen Zieltemperatur im *Divertor* ($T_t \ll 10 \text{ eV}$) sowie der Leistung, die aus dem Kernplasma heraus strömt (P_{SOL}) und des durch Wärmeleitung entlang der magn. Feldlinien abführbaren Wärmeflusses ($q_{||}$);
 - die Separatrixdichte (n_{sep}) folgt aus der zum *Detachment* benötigten hohen Divertordichte ($n_t > n_{sep}$), welche eine erhöhte Stößigkeit und Strahlungsrekombination im Divertor sowie den für den Transport erforderlichen Druckgradienten ∇p , zwischen dem Plasma der oberen Mittelebene und des Divertors, erzeugt;
3. außerhalb der Separatrix (i.e. im SOL) durch das Verhältnis zwischen Teilchentransport senkrecht zu den magnetischen Feldlinien, i.e. durch Diffusion (D_{\perp}) sowie Konvektion (v_{\perp}), und parallel ($\tau_{||}$) zu den magnetischen Feldlinien (zum Divertor), bestimmt.

Dazu wurde ausgehend vom DEMO1-*Baseline-Design*,¹⁸ allerdings spezifisch für eine Fusionsleistung von $P_{Fus} = 2 \text{ GW}$,

- die Energieeinschlusszeit im Kernplasma anhand der *IPB98(y,2)-Skalierung*¹⁹ (Gl. 3.19) auf $\tau_E \approx 6 \text{ s}$ geschätzt,

¹⁷Dasselbe gilt in den Fällen höherer Separatrixdichte sowie stärkerer Neutralenabschirmung (Hochdichtefall (HDF), kritische-Dichtefall (KDF); Tab. 6.1).

¹⁸Die Parameter des europäischen *Baseline-Designs* von DEMO1 werden in Kap. 3.5 diskutiert.

¹⁹Die *IPB98(y,2)-Skalierung* ist das am weitesten verbreitete Skalierungsgesetz für den Energieeinschluss, ausgedrückt in Ingenieursparametern, basierend auf H-Moden Plasmen mit ELMs: $\tau_E = 0.1445 H_H^{0.93} R_0^{1.39} a^{0.58} \kappa_x^{0.78} n_{20}^{0.41} B_0^{0.15} M_{eff}^{0.19} P_L^{-0.69}$; Kap. 3.2.8 sowie Anh. C.3.

- mit einer *H-Moden-Schwelle* von $P_{LH} \approx 133$ MW (*Martin-Skalierung*²⁰),
- sowie einem Wärmetransport senkrecht zu den magn. Feldlinien von $\chi_{\perp} \approx a^2 \tau_E^{-1} = 1,2 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$.
- das *Greenwald-Limit* auf $n_{GW} = 9 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$ geschätzt (mit Gl. 3.21 nach Greenwald[53]),
- sowie die benötigte Mindestdichte an der Separatrix der oberen Mittelebene, welche das zur gezielten Leistungsabfuhr benötigte Regime des *Detachments* ermöglicht, zu $n_{det} \approx 4 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$ (*2-Punkt-Modell* nach Stangeby, Gl. 5.118[134]) geschätzt,
 - bei einer Separatrixtemperatur von $T_{sep} \approx 300$ eV,
 - einer Targettemperatur im Divertor von $T_t = 2$ eV,
 - und einem parallelen Wärmetransport von $q_{\parallel} = 6,5 \text{ GW/m}^2$.

Ausgehend von diesen Maschinenkennzahlen wurden drei Fälle unterschiedlicher Pedestal- sowie Separatrixdichte (obere Mittelebene) definiert (Tab. 6.1).

Tabelle 6.1.: Auswahl der Randschicht- und SOL-Parameter. Der Dichtegradient im Pedestal variierte zwischen $\nabla n_{ped} = -(1,62 - 2,54) \cdot 10^{20} \text{ m}^{-4}$. Die Pedestalbreite betrug $\Delta_{ped} = 0,07 \cdot a \approx 18,5$ cm. Die Fusionsleistung wurde konstant mit $P_{Fus} = 2$ GW angenommen.²¹

Testfall	n_{ped}/n_{GW}	n_{sep}/n_{det}	D_{\perp} [m ² /s]	v_{\perp} [m/s]	T_{ped} [keV]	Δ_{SOL} [cm]
Niedrigdichte	0,85	1,125	0,016 - 0,02	1 - 1,1	4,6	5 - 42,5
Hochdichte	1	1,25	0,012 - 0,017	0,9 - 1	3,7	5 - 42,5
Krit. Dichte	1,15	1,5	0,008 - 0,012	0,7 - 0,85	3,1	5 - 42,5
„Stellarator“	1,3	1,75	0,035 - 0,08	0,7 - 0,9	3,0	5 - 42,5

Dabei wurde für jeden Testfall der senkrechte diffusive Transport so gewählt, dass die Bedingung

$$c_{He}^{-1} \Phi_{DT \rightarrow He} A_{sep}^{-1} = -D_{\perp} \nabla n_{ped} \quad (6.1)$$

erfüllt wurde, mit c_{He} : *Heliumkonzentration* im Kernplasma, $\Phi_{DT \rightarrow He}$: Kernfusionsrate im Kernplasma (Reaktion: $D+T \rightarrow He+n$), A_{sep} : Oberfläche der letzten geschlossenen magnetischen Flussfläche, ∇n_{ped} : Dichtegradient im Pedestal.

Die Testfälle wurden so definiert, dass im Kernplasma eine Heliumkonzentration von $c_{He} \approx 1\%$ vorherrschte.²²

²⁰Die benötigte Heizleistung zum Übergang von der L- zur H-Mode wurde von Martin *et al.* anhand von Daten der *ITPA CDBM Datenbank* im Hinblick auf das Design von ITER untersucht. Dabei wurde die empirische Relation $P_{LH} \approx 2,15 \cdot e^{0,107 \bar{n}_{20}^{0,782}} B_T^{0,772} a^{0,975} R^{0,999}$ zum Übergang in die H-Mode abgeleitet.[100] Für DEMO-Designs wird gefordert, dass die Leistung, die über die Separatrix strömt, die *H-Moden-Schwelle* übersteigt, i.e. $P_{sep} \geq P_{LH}$.

²¹Aufgrund der verschiedenen Dichteelevel in der Plasmarandschicht (Pedestal, Separatrix) würde eine konstante Fusionsleistung in einer 1-d Modellierung nur durch leichte Variationen des *Peakingfactors* α_n im parabolischen Teil des Dichteprofiles (Kernplasma) erreicht. Im Rahmen dieser Studien wurden jedoch keine derartigen -kleinen- Anpassungen von α_n berechnet, da diese keine Auswirkungen auf die untersuchten Prozesse der Plasmarandschicht haben.

²²In erster Näherung entsprechen die Flussverhältnisse im Kernplasma den Dichteverhältnissen. Mit dieser Annahme und jener einer über den Plasmaquerschnitt konstanten Fusionsrate, wurde sichergestellt, dass die in der Rechenroutine gefundenen Gleichgewichtsflüsse zwischen dem Kernplasma und dem SOL (Kap. 4.6) für alle Testfälle möglichst einheitlich die vorgegebene Heliumkonzentration, bzw. den Anteil an verbranntem Brennstoff im Kernplasma, ergaben; Anh. A.5 Gl. A.8 - A.9.

Erläuterungen zu den Testfällen aus Tab. 6.1:

1. ein Niedrigdichtefall (NDF): mit $n_{ped} = 0,85 n_{GW}$ sowie $n_{sep} = 1,125 n_{det}$, für den anhand eines Skalierungsgesetzes für den *Druck an der Pedestalspitze* (Kap. 3 Gl. 3.20; $p_{ped} \propto n_{ped}^{-0,33}$, *ITER-Physics-Basis*[33]), aus dem *idealen Gasgesetz* ($pV = nk_B T$) eine Pedestaltemperatur von $T_{ped} = 4,6$ keV folgte;
2. ein Hochdichtefall (HDF): mit $n_{ped} = n_{GW}$ sowie $n_{sep} = 1,25 n_{det}$, für den eine Pedestaltemperatur von $T_{ped} = 3,7$ keV folgte;
3. ein kritische-Dichtefall (KDF): mit $n_{ped} = 1,15 n_{GW}$, i.e. mit einer 15 % über dem *Greenwald-Limit*²³ liegenden Pedestaldichte sowie $n_{sep} = 1,5 n_{det}$, für den eine Pedestaltemperatur von $T_{ped} = 3,1$ keV folgte;
4. sowie ein Stellaratorfall (SF): mit $n_{ped} = 1,3 n_{GW}$ und $n_{sep} = 1,75 n_{det}$. Die Pedestaltemperatur wurde im Vergleich zum KDF geringfügig verringert und auf $T_{ped} = 3$ keV gesetzt.²⁴

Letzterer wurde als SF deklariert, da die Pedestaldichte für einen Tokamak *überkritisch* wäre und da beim Stellarator eine wesentlich großzügigere Dichtegrenze existiert, die nach Giannone *et al.* teilweise über das doppelte der *Greenwald-Dichte* beim Tokamak hinaus geht.[51]

Da die Verbindungslängen im SOL für den Stellarator im Mittel etwa eine Größenordnung länger sind als beim Tokamak, wurde gemäß Helander *et al.* mit einer modifizierten *Stellarator-Verbindungslänge* von $L_{||}^* \approx 10 \cdot L_{||}$ gerechnet; $L_{||}$ beschreibt die Verbindungslänge im Tokamak und $L_{||}^*$ beschreibt jene eines Stellarators analoger Form und Größe.[61]

Dadurch konnte auch, im Rahmen des für Tokamaks entwickelten CELLSOR-Modells, eine wesentliche Eigenschaft des Stellarators wiedergegeben werden: ein erhöhtes Wandrecycling durch den stärker wirkenden Transport senkrecht zu den magn. Feldlinien.

Der mittlere Wandabstand der Separatrix wurde für alle Fälle zwischen $5 \leq \Delta_{SOL} \leq 42,5$ cm variiert. Zudem wurden für jeden Testfall Rechnungen für diffusiven und konvektiven Transport durchgeführt. Der Sicherheitsfaktor der Tokamak-Testfälle betrug $q_{cyl} = 3$.

6.5.1. Abschätzung der konvektiven Transportstärke

Der konvektive Transportfall wurde aufgrund neuerer experimenteller Beobachtungen beim Plasmatrieb am JET, am COMPact ASSEMBLY (COMPASS), an Alcator C-MOD, an D3D, am Japan Torus-60 (JT-60) sowie am AUG hinzugezogen.²⁵[87, 88, 93, 110, 106, 22, 46]

²³Das *Greenwald-Limit* stellt keine scharfe, prediktive Grenze dar. Typischerweise werden im Rahmen von integrierten Systemstudien DEMO1 Parameter mit $n_{ped} \leq 1,2 n_{GW}$ publiziert.[127, 124, 43, 155, 10] Aus Sicht der Diagnostik und Kontrolle für DEMO1 könnte es - je nach weiterem Erkenntnisstand - notwendig sein, DEMO1 mit $n_{ped} \leq n_{GW}$ zu betreiben. Ongena *et al.* sowie Mahdavi *et al.* gelang es, für stark gespitzte Dichteprofile im Kernplasma an Divertor-Tokamaks, H-Moden-Plasmaentladungen mit ELMs mit bis zu 140% der *Greenwald-Dichte* reproduzierbar und ohne Disruptionen zu betreiben.[112, 98]

²⁴Die *Pedestaldruckskalierung* aus derIPB[33] hat für den Stellarator keine Gültigkeit. Eine vergleichbares MMSG existiert für den Stellarator nicht.

²⁵Dabei wurde beobachtet, dass die Ionendichte im SOL auch wandnah nur schwach abfällt. Dies führt zur Ausbreitung einer sog. *Dichte-Schulter*. Ferner wurden für das konvektive Regime exp. zeitlich gemittelte, effektive konvektive Blob-Geschwindigkeiten im Bereich von $20 \leq v_{\perp} \leq 200$ m/s abgeleitet; die DEMO1-Relevanz ist nicht zwingend gegeben, da an deutlich kleineren Tokamaks mit vergleichsweise niedriger Energieeinschlussgüte, ausschließlich über wenige Zentimeter des SOL, mit großen Unsicherheiten gemessen und gemittelt wurde.

Der konvektive Transport wurde im Rahmen dieser Studien mit gezielten Schätzwerten für v_{\perp} derart modelliert (Tab. 6.1), dass die Teilchenbilanzen im Modell zwischen Kernplasma und SOL ein konsistentes Bild ergaben (Anh. A.5); dies geschah für eine Heliumkonzentration von $c_{He} \approx 1\%$.²⁶ Durch diesen Algorithmus zur Berechnung von v_{\perp} ist das CELLSOR-Modell nicht nur selbstkonsistent zwischen Dichte und Transportstärke im SOL sowie der Teilchenbilanz Kernplasma-SOL, sondern auch plausibel in der Brennstoffverbrennungsrate und dem Gesamtteilchendurchsatz an DEMO1.

Hohe Blob-Geschwindigkeiten

Das CELLSOR-Modell wurde außerdem unter hohen Werten für die konvektive Transportgeschwindigkeit getestet, verglichen mit den typischen Werten aus obigem Algorithmus. Die Annahme von $v_{\perp} = 50$ m/s (in Anlehnung an LaBombard *et al.*[88]) konstant über den gesamten SOL führte im CELLSOR-Modell zu winzigen Verbrennungsraten und Heliumkonzentrationen (wenige Promille) im Kernplasma, sowie untolerierbar hohen Zuflüssen der *ext. Brennstoffzufuhr* ($\Gamma_{ext} \approx 2 - 4 \cdot 10^{21} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$).²⁷ Zudem folgten hohe durch Neutralteilchen und Ionen auf die erste Wand getragene Leistungen von bis zu 89 MW. Wahrscheinlich werden an DEMO1 eher kleinere Werte für v_{\perp} , i.e. im Bereich von m pro s, zu beobachten sein.

6.5.2. Profil der Elektronentemperatur

Abb. 6.4 zeigt den Histogrammverlauf der Elektronentemperatur T_e zwischen der ersten Wand und der Pedestalspitze. Der starke Temperaturabfall dicht hinter der Separatrix mit $\lambda_{T_1} = 1$ mm wurde aus dem für DEMO1 vorhergesagten, starken radialen Abfall der Leistung λ_q gefolgert.²⁸ Die radiale Abfalllänge der Leistung im SOL an DEMO1 wurde von Rubino *et al.* auf $\lambda_q \approx 1 - 4$ mm geschätzt (dies deckt sich mit Resultaten aus dem *Skalierungsgesetz*²⁹ von Eich *et al.*).[39, 129] Für die Temperatur wurde daher - gemäß $P \propto n_e T_e^{1,5}$ - eine Abfalllänge im mm-Bereich angenommen.³⁰[133]

Die im Rahmen dieser Arbeit getätigten PWW-Studien für DEMO1 zeigten keine Sensitivität zum Parameter λ_{T_1} ; bei CELLSOR-Rechnungen mit $0,1 \leq \lambda_{T_1} \leq 1,5$ cm.

Nach dem starken Abfall der Temperatur auf die vorgegebene *Zieltemperatur*³¹ $T_{min} = 10$ eV wurde für den restlichen SOL eine deutlich erhöhte Abfalllänge von $\lambda_{T_2} = 60,6$ cm angenommen. Die Dimensionierung dieser zusätzlichen Abfalllänge wurde aus Plausibilitätsgründen so gewählt, dass die Plasmatemperatur auch für große Wandabstände $\Delta_{SOL} \gg 10$ cm den für das Randschichtplasma typischen Bereich von einigen eV nicht unterschritt.

²⁶Für noch niedrigere Heliumkonzentrationen wäre der Gesamtteilchendurchsatz, also die injizierten sowie abgepumpten Teilchenflüsse sowie der Durchsatz der *Tritiumanlage*, erheblich zu hoch.

²⁷Die negativen Folgen des wachsenden Tritium-Inventars in einer Maschine mit erhöhten *ext. Brennstoffzuflüssen* Γ_{ext} zeigte bereits eine Auswertung der Modellierung der externen Gaszufuhr an DEMO1 im NDF; Kap. 6.4.

²⁸Die Grobheit (Zellbreite $\Delta_{cell} \approx 2,7$ mm) sowie Homogenität der Diskretisierung der abgebildeten Rechnung führte dazu, dass es aufgrund des starken radialen Temperaturabfalls, i.e. $\lambda_T = 1$ mm, zu einem Sprung der Zelltemperaturen an der Separatrix von 300 eV auf 10 eV kam.

²⁹Der radiale Abfall der Leistung im SOL skaliert - anders als die thermische Fusionsleistung bzw. die Energieeinschlusszeit - kaum mit der Maschinengröße. Eich *et al.* leiteten für H-Moden-Entladungen mit Typ-I ELMs aus einer Multi-Maschinen-Datenbank mit Plasmaentladungen der Tokamaks JET, DIII-D, AUG, C-Mod, National Spherical Torus Experiment (NSTX) und Mega-Ampere Spherical Tokamak (MAST) ab, dass $\lambda_q \propto B_{tor}^{-0,8} 495^{1,1} P_{SOL}^{0,1} R_{geo}^0$. [39]

³⁰Mekkaoui *et al.* schätzten für ITER eine Abfalllänge der Temperatur von $\lambda_T \approx 1,7$ cm.[102] Rubino *et al.* führten zudem Studien mit den Codes EDGE2D, EIRENE und TECXY für den SOL an DEMO durch und folgerten $\lambda_T \approx 1,5$ cm (extrahiert aus Abb. 4 (d) in der Arbeit von Rubino *et al.*).[129]

³¹Die Zelltemperaturen der verschiedenen Testfälle waren innerhalb des SOL - für jedes Δ_{SOL} - identisch.

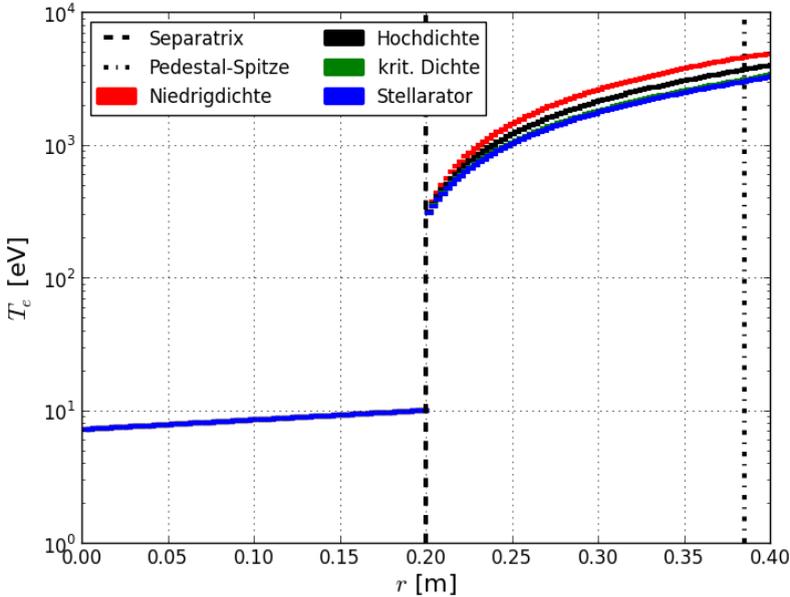


Abbildung 6.4.: Histogrammverlauf der Elektronen-Zelltemperatur zwischen der ersten Wand und der Pedestalspitze; für $\Delta_{SOL} = 20$ cm.

Abb. 6.4 zeigt weiterhin - auch aufgrund der Dichteabhängigkeit der IPB-Skalierung des Pedestaldrucks³² - unterschiedliche Verläufe der Temperaturen im Pedestal, welche aus den Parametern der Testfälle in Tab. 6.1 resultieren.

6.6. Routine zur Durchführung der Erosionsstudien

Im Folgenden wird die Methodik zum Studium der Erosion anhand der Testfälle aus Tab. 6.1 dargelegt.

6.6.1. CELLSOR-Rechnung ohne Ionisationsquellen

Zunächst wurde für jeden Testfall eine MC-Rechnung mit CELLSOR gestartet, bei der die *Kontinuitätsgleichung* (Gl. 4.71) ohne volumetrische Ionisationsquellen gelöst wurde (Gl. 4.80).³³ Neben der Lösung des Brennstoffionen-Dichteprofiles $n_i(x)$ ($x = 0$: Separatrix, $x = \Delta_{SOL}$: erste Wand) und dem daraus folgenden Teilchenfluss Γ_{\perp} auf die erste Wand folgte die Ermittlung des Neutralgasprofils $n_n(x)$ sowie der volumetrischen Quellstärke $Q(x)$ und den zur Lösung der KGL mit Ionisationsquellen benötigten Funktionalen $\Psi_1(x)$ und $\Psi_2(x)$.³⁴

³²Kap. 3.2.8.

³³Dazu wurde der Parameter `SOL_source_switch == 2` gesetzt.

³⁴Ein finales Quellprofil $Q(x)$ - bezogen auf die Iterationen - ist im Anh. B.6.1 in Abb. B.4 dargestellt.

6.6.2. CELLSOR-Rechnungen mit Ionisationsquellen

Im nächsten Schritt wird ein Iterationsschema gestartet (Kap. 4.5.2),³⁵ bei dem CELLSOR unter Weitergabe der Profile $Q(x)$, $\Psi_1(x)$ und $\Psi_2(x)$ Rechnungen beginnt, bei denen ein Feedback zwischen Ionen- und Neutralgasprofil durch Iterationen erstellt wird, bis es zum Auffinden eines Gleichgewichtszustands kommt (Konvergenzkriterium, Gl. 4.85), i.e. die KGL (Gl. 4.71) wird mit volumetrischen Ionisationsquellen gelöst (Gl. 4.75).³⁶

6.6.3. Aufstellung der Teilchenbilanz im SOL

Nach dem Auffinden des Gleichgewichtszustandes zwischen Ionen- und Neutralgasprofil für die vorgegebenen Transportparameter D_{\perp} und v_{\perp} , die Zeitkonstante τ_{\parallel} und die Elektronendichte n_{sep} an der Separatrix folgen die Teilchenflüsse Γ [$\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$] bzw. Teilchenentstehungs- und -abfuhraten Φ [s^{-1}] im SOL:

- die Verlustrate Φ_{\parallel} an Ionen zum Divertor / x-Punkt (untere Fläche), durch Integration über die Breite des SOL (Δ_{SOL}) sowie entlang von z (in Richtung Divertor),
- die Verlustrate Φ_{FW} an Ionen durch Kontakt mit der ersten Wand (seitliche Fläche), durch Auswertung von n_i sowie ∇n_i bei $x = \Delta_{SOL}$ (Gl. 4.72),
- die Ionen-Geburtsrate Φ_Q durch Elektronenstoßionisation (im SOL-Volumen), durch Volumenintegration (Gl. 4.94).

Die Summe der Teilchenraten im SOL ergibt folglich die Rate des Teilchenzuflusses, der aus dem Kernplasma über die Separatrix in den SOL strömt.³⁷

Ermittlung der stationären Heliumkonzentration im Kernplasma

Aus der Teilchenbilanz im SOL wird nun - unter Vorgabe der Fusionsleistung P_{Fus} im Kernplasma die stationäre Heliumkonzentration c_{He} ermittelt, welche sich im Kernplasma einstellen müsste (Gl. 4.93), damit die Rate $\Phi_{sep,in,i}$ mit der D-T-Ionen separatrixseitig in den SOL strömen, gleich der Summe der zuvor aufgelisteten Ionenraten - aus dem SOL heraus - ist (Bilanzgleichung 4.91). Eine kleine Heliumkonzentration entspricht folglich einer schwachen *Verbrennungsrate*, i.e. Fällen bei denen ein Großteil der DT-Ionen das Kernplasma ohne Beteiligung an Kernfusionsreaktionen wieder verlässt.³⁸

6.6.4. Ermittlung der Rate an externer Brennstoffzufuhr

Da weiterhin zum Aufrechterhalten stationärer Verhältnisse im Kernplasma gelten muss, dass mit derselben Rate Ionen das Kernplasma verlassen, wie im Kernplasma Ionen durch Ionisation der ext. zugeführten Brennstoff-Neutralen entstehen, gibt CELLSOR auch die Rate $\Phi_{sep,out,n}$ an, mit der zuvor an der Wand durch Recycling geborene Neutrale aus dem SOL ins Kernplasma gelangen.

³⁵Dazu wird der Parameter `SOL_source_switch == 1` gesetzt.

³⁶In den meisten Fällen - insbesondere niedriger Ionendichte im SOL - geschieht dies innerhalb von 1-2 Iterationen.

³⁷Betrachtet man den SOL als mit Wasser gefülltes Glas mit einem Loch im Boden und an einer Seite, und betrachtet man ferner das Kernplasma als eine das Glas auffüllende Karaffe, so wird an dieser Stelle vom Modell festgelegt, wieviel Wasser pro Sekunde von der Karaffe ins Glas gekippt werden muss, damit dessen Wasserpegel stationär bleibe, i.e. bei welcher Quellrate im Kernplasma sich die SOL-Dichte ergäbe.

³⁸Man spricht dabei auch von einer niedrigen *burnup-fraction* f_{burn} .

Anschließend wird die Rate $\Phi_{F_{uel,sep}}$ ermittelt, welche angibt wieviele Neutralteilchen durch ext. Zufuhr ins Kernplasma eingebracht werden müssen.³⁹ Diese entspricht genau der Differenz aus Ionenverlustrate des Kernplasmas (abzgl. Ionenquellen im SOL) und *Fuellung*-Beitrag durch das Wandrecycling, i.e. dem benötigten Beitrag der ext. Zufuhr.

Nach der Ermittlung der benötigten Zufuhr-Rate $\Phi_{F_{uel,sep}}$ auf Höhe der Separatrix wurde zunächst abgeschätzt welcher Quellrate $\Phi_{F_{uel,ext}}$, d.h. welcher Zufuhrrate an der Stelle der Wand, also am Ausgang des Pellet-Injektors, dies entspräche.⁴⁰

CELLSOR berechnet also die Eindringtiefen für Neutrale der ext. Zufuhr, deren Umalungspeditionen und deren Energie- und Winkelverteilung beim Wandaufprall. Die daraus resultierenden ZA'en, i.e. die Wandschädigung durch auftreffende Neutrale (D,T) und schätzt die Schädigung durch Ionen anhand der berechneten Wandflüsse und des Schichtpotenzials ab.

6.6.5. Annahmen für Parameter im Modell der Brennstoffzufuhr

Für das Pellet-Modell des CELLSOR-Codes wurde $v_{pel} = 1000$ m/s und $\nu_{pel} = 20$ Hz gewählt.⁴¹ Dies kann sowohl als konservative Annahme gewertet werden, da solche Parameterwerte beim Pellet-Injektionssystem an AUG bereits erreicht wurden, als auch als optimistische Annahme, da es sich einerseits auf die erreichten Spitzenwerte bezieht und da die übrigen entwickelten Pellet-Injektions-Systeme anderer Tokamaks noch nicht bei derart hohen Geschwindigkeiten sowie Kanonenfrequenzen angekommen sind.⁴²

Ein mit CELLSOR gerechnetes Ablationsprofil ist im Anh. B.6 (Abb. B.3) abgebildet.

6.6.6. Berechnung der prompten Redeposition

Neben der Ermittlung der Raten bzw. Flüsse sowie Quellen und Senken für Ionen und Neutrale folgten aus der CELLSOR-Rechnung des Gleichgewichtsfalls auch Daten über die PWW durch Pedestal-Neutrale, freigesetzt durch CX-Stöße mit Atomen des Wandrecyclings (Rec.-CXn), i.e. die mittlere ZA \bar{Y}_{CXn} sowie die mittlere Energie \bar{E}_{kin} der Neutralen beim Wandaufprall. Diese Daten wurden zur Konstruktion der TT-Quelle bzw. der *Thompson-Energieverteilungen* an CELLSOR ERO übergeben, ebenso wie die *Heliumkonzentration* c_{He} und die Annahmen des Ionenmodells, d.h. deren *mittlere Ladungszustände* und Konzentrationen beim Eintritt in die Schicht.

Für die Ionen wurden nun auch die Daten der PWW (\bar{Y}_i, \bar{E}_i) ermittelt und damit jene der Neutralen zur Konstruktion der W-TT-Quelle ergänzt (Gl. 4.55).

Die CELLSOR ERO-Rechnung liefert die prompte Redeposition f_{dep} (Gleichungen 3.33 - 4.66). Ferner wird die *Selbsterstäubungsausbeute* $Y_{W+ \rightarrow W}$ (Gl. 4.70) generiert.

³⁹Es kann für schwachen Senkrechttransport sowie großes $\tau_{||}$ passieren, dass der Löwenanteil der Neutralenzufuhr ins Kernplasma durch Wandrecycling geschieht, und nur ein kleinerer Anteil durch ext. Zufuhr bereitgestellt werden muss. Für DEMO1 wurde dieser Fall im Rahmen dieser Studien jedoch nicht beobachtet.

⁴⁰Dazu wurde CELLSOR mit dem Parameter `gasvalve == 'pel_fuel'` gestartet. Durch Zählen an der Separatrix wurde ermittelt, welcher Nettoanteil f_{gv} der wandseitig startenden Brennstoff-Neutralen bis ins Kernplasma vordringt; im Falle der Pellet-Injektion werden stets $\geq 95\%$ der wandseitig startenden Brennstoffneutralen innerhalb des Kernplasmas ionisiert. Nach Beendigung der Rechnung wird mithilfe dieses Faktors ausgerechnet wie stark die Quellrate $\Phi_{F_{uel,ext}}$ an der Wand sein müsste, damit die Teilchenbilanz durch die Separatrixoberfläche ausgeglichen wird.

⁴¹Die Zentrifuge des AUG-Systems erreicht Pellet-Geschwindigkeiten von $v_{pel} = 1000$ m/s bei einer Kanonenfrequenz von bis zu $\nu_{pel} = 62$ Hz, die angenommene Kanonenfrequenz von $\nu_{pel} = 20$ Hz ist folglich eine konservative Annahme.[89, 113, 90, 91]

⁴²Ploeckl *et al.* zeigten eine Übersicht über verschiedene Pellet-Injektorsysteme.[113] Beim JET-System werden $v_{pel} = 160$ m/s und $\nu_{pel} = 5$ Hz erreicht. Li *et al.* berichten für das Pellet-Injektorsystem des *Experimental Advanced Superconducting Tokamak* (EAST) von $v_{pel} = 300$ m/s und $\nu_{pel} = 10$ Hz.[92]

Die *Selbsterstäubung* wird durch einfach ionisierte Wolframteilchen verursacht, welche im Zuge der Gyration um magn. Feldlinien auf die Wand zurückkehren.

6.7. Diskussion der Ergebnisse der PWW-Studien

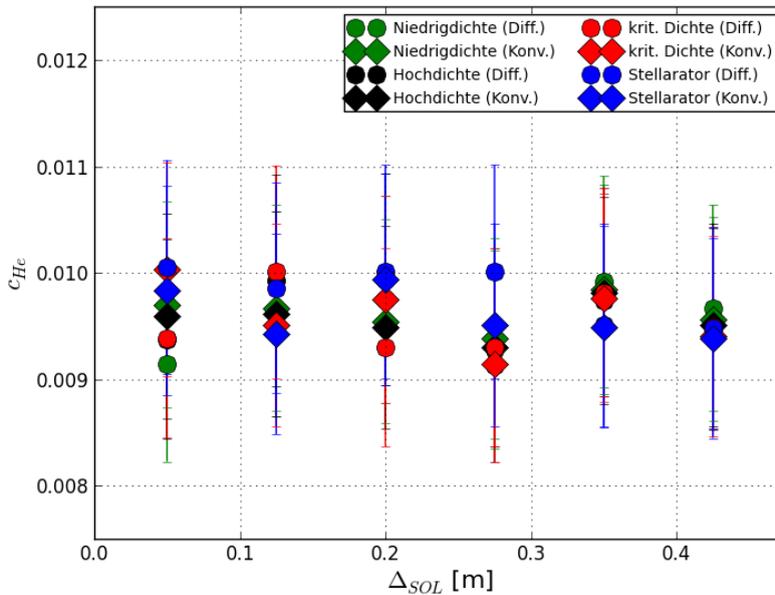


Abbildung 6.5.: Stationäre Heliumkonzentration⁴³ des Kernplasmas für die verschiedenen SOL-Testfälle.

Die Diskussion der Ergebnisse der PWW-Studien erfolgt für die vier unterschiedlichen Testfälle aus Tab. 6.1, i.e. Niedrigdichtefall (NDF), Hochdichtefall (HDF), kritische-Dichtefall (KDF) sowie eines Stellaratorfalls (SF).

Die Transportparameter D_{\perp} und v_{\perp} wurden vorab so geschätzt, dass das resultierende Verhältnis der Raten mit denen Ionen durch das Kernplasma in den SOL strömen (Φ_{sep}^+ , s. Abb. 6.3) und der Verbrennungsrate Φ_{DT} mit der Brennstoff zu Helium umgewandelt wurde, in erster Näherung zu einer stationären Heliumkonzentration im Kernplasma von $c_{He} \approx 1\%$ führte.⁴⁴

Das Schätzen von D_{\perp} und v_{\perp} geschah analytisch im quellfreien Fall. Anschließend löste CELLSOR die *Kontinuitätsgleichung* im SOL mit Ionisationsquellen für die vorab geschätzten Werten für D_{\perp} und v_{\perp} .⁴⁵

Abb. 6.5 zeigt die aus den CELLSOR-Rechnungen mit Ionisationsquellen im SOL resultierenden Heliumkonzentrationen, sowohl im diffusiven, als auch im konvektiven Transportfall. Diese variierten für die verschiedenen Testfälle und Wandabstände zwischen $0,92 \leq c_{He} \leq 1,01\%$; mit Mittelwert $\bar{c}_{He} = 0,96\%$ und Standardabweichung $\sigma_{c_{He}} = 0,025\%$.

⁴³Berechnet nach Gl. 4.93 (Kap. 4.6.1).

⁴⁴Der Algorithmus zur Vorauswahl von D_{\perp} und v_{\perp} im quellfreien SOL wird im Anh. A.5 diskutiert.

⁴⁵Eine Beschreibung der Methodik der Lösungsfindung kann in Kap. 6.6.6 gefunden werden.

Die aufgrund der Flussbilanz zwischen Kernplasma und SOL resultierenden Quellflüsse im Kernplasma (Gl. 4.91) variierten analog.⁴⁶

6.7.1. Ionendichte im SOL

Die Testfälle (Tab. 6.1) wurden so aufgesetzt, dass die Raten mit denen Brennstoffteilchen durch das Kernplasma und den SOL strömen für sämtliche Testfälle möglichst identisch waren. Da die Fälle mit unterschiedlichen Separatrixdichten sowie deren Gradienten aufgesetzt wurden, bedeutete dies, dass die Transportstärken im SOL im Falle höherer Separatrixdichten reduziert wurden.

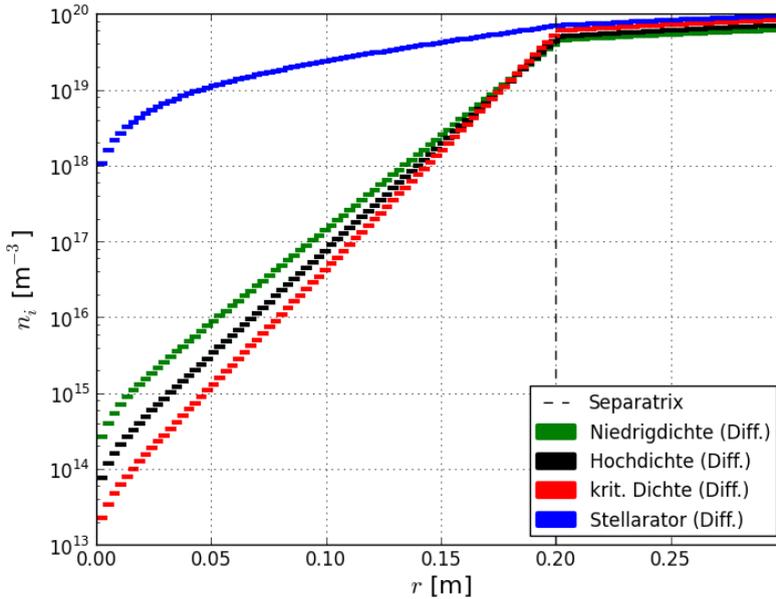


Abbildung 6.6.: Ionendichteprofil der Testfälle aus Tab. 6.1; berechnet durch analytische Lösung der *Kontinuitätsgleichung* mit rein diffusivem Transport im SOL ($D_{\perp} > 0$, $v_{\perp} = 0$), senkrecht zu den magnetischen Feldlinien.

Abb. 6.6 zeigt die resultierenden Ionendichteprofile, welche im SOL selbstkonsistent durch analytische Lösung der Kontinuitätsgleichung mit rein diffusivem Transport ($D_{\perp} > 0$, $v_{\perp} = 0$) berechnet wurden;⁴⁷ für die korrespondierende Abfalllänge gilt: $\lambda_n = \sqrt{D_{\perp} \tau_{\parallel}}$.

Abb. 6.1 zeigt schematisch die verschiedenen Kanäle der Wandschädigung durch PWW im Hauptraum. Unter anderem können durch CX-Stöße Brennstoff-Neutralteilchen im *Pedestal* freigesetzt werden, welche mit Energien oberhalb von 1000 eV in Richtung der ersten Wand fliegen (keV-Ped.-Neutrale).

Ein hochdichter SOL könnte dabei eine Reabschirmung gegen diese Pedestal-Neutrale mit keV-Energien (keV-Ped.-Neutrale) aufweisen, falls es innerhalb des SOL zu weiteren CX- oder Ionisationsstößen käme.

⁴⁶Diese sollten möglichst identisch sein, um für jeden Testfall und untersuchten Wanabstand Δ_{SOL} dieselbe Randschichtphysik und deren Auswirkung auf die Erosionsrate untersuchen zu können.

⁴⁷Abb. A.2 zeigt die Ionendichteprofile der Testfälle im Falle konvektiven Transports.

Da CX-Stöße im SOL typischerweise deutlich wahrscheinlicher sind als Ionisationsstöße, soll für eine erfolgreiche Reabschirmung gegen keV-Ped.-Neutrale gelten, dass die *mittlere freie Weglänge*⁴⁸ $\lambda_{mfp,CX}$ für CX-Stöße innerhalb der SOL-Breite Δ_{SOL} liegt, i.e.

$$\lambda_{mfp,CX} \leq \Delta_{SOL}. \quad (6.2)$$

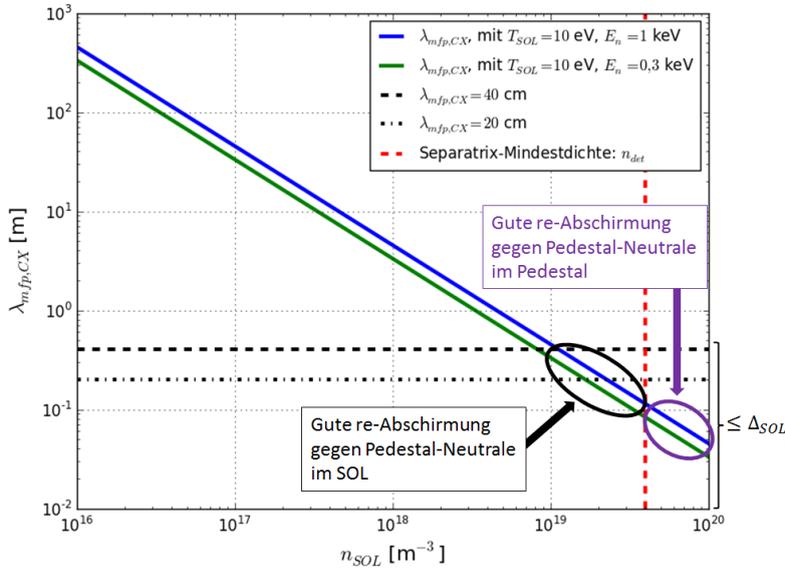


Abbildung 6.7.: Mittlere freie Weglänge für CX-Stöße für ein Wasserstoff-Neutralteilchen der Masse m_{DT} mit einer Energie von $E = 1$ keV in einem Plasma der Ionentemperatur $T_i = 10$ eV, als Funktion der mittleren Ionendichte n_i .

Abb. 6.7 zeigt die mittlere freie Weglänge für ein Wasserstoffneutralteilchen der mittleren Masse $m_{DT} = 0,5 \cdot (m_D + m_T)$ mit einer Energie von $E_n = 1$ keV in einem Plasma der Ionentemperatur $T_i = 10$ eV, als Funktion der mittleren Ionendichte n_i .⁴⁹

Damit die Bedingung $\lambda_{mfp,CX} \leq \Delta_{SOL}$ aus Gl. 6.2 für die in diesem Kapitel studierten Wandabstände von $\Delta_{SOL} \leq 42,5$ cm erfüllt würde, müsste die mittlere Ionendichte im SOL $\bar{n}_i \geq 10^{19} \text{ m}^{-3}$ betragen.

Eine Reabschirmung gegen derart energiereiche D-T-Neutrale dürfte ausschließlich der SF erreichen, da bei diesem - neben der höheren Separatrixdichte - der Transport senkrecht zu den magnetischen Feldlinien, aufgrund der im Mittel etwa 10-fach erhöhten Verbindungslänge L_{\parallel}^* , stärker wirkt und somit zu einer höheren radialen Ionendichte im SOL führt.

⁴⁸Def. in Kap. 3.2.6.

⁴⁹Aufgrund des schwachen Temperaturabfalls ($T_i(x \geq 4 \text{ mm}) = 5 - 10$ eV) über nahezu die gesamte SOL-Breite Δ_{SOL} - mit Ausnahme von wenigen mm Nahe der Separatrix - (Abb. 6.4), wird der lokale Reaktionsratenkoeffizient, i.e. $\langle \sigma v_{ped} \rangle_{CX}(n_i(x), T_i(x))$, im SOL vorwiegend über die Dichte $n_i(x)$ des lokalen Plasmahintergrunds sowie die Geschw. v_{ped} des Ped.-Neutralen festgelegt.

6.7.2. Variationen des mittleren Wandabstandes der Separatrix

In diesem Abschn. wird die globale Nettoerosion, welche sowohl durch Ionen als auch durch Neutrale erfolgt, für verschiedene mittlere Wandabstände Δ_{SOL} diskutiert; bei der Neutralenschädigung wird noch zwischen CX-Stößen mit Atomen des *Wandrecyclings* (Rec.-CXn) bzw. des *Pellet-Fuellings* (Pel.-CXn) unterschieden.

Als Kernhypothese wird angenommen: eine Vergrößerung des Wandabstandes Δ_{SOL} dürfte

1. eine Reduktion des auf die Wand strömenden Ionenflusses sowie damit einhergehend des zurück ins Plasma kehrenden Recyclingflusses zur Folge haben. Der Schaden durch Ionen sowie durch Ladungsaustauschstöße freigesetzte Atome (CXn) dürfte folglich reduziert werden. Bei den Ionen dürfte neben der Flussreduktion auch aufgrund des durch das kältere wandnahe Plasma geringeren Schichtpotenzials die hervorgerufene Zerstäubung reduziert werden;
2. den Anteil prompt redeponierender Teilchen, welche durch Ionen sowie Neutrale erodiert wurden, absenken, da das kältere wandnahe Plasma sowohl zu einer vergrößerten mittleren freien Weglänge für Ionisationsstöße, als auch zu einem verringerten Gyrationradius führt.
3. im Falle großer Abstände $\Delta_{SOL} \gg 10$ cm sowie hoher SOL-Dichten dazu führen, dass es für im heißen Pedestal ablatierte und dann umgeladene Neutralteilchen zu einer - nun in Richtung Wand betrachteten - Neutralen-Reabschirmung für hochenergetische Neutrale kommen könnte.⁵⁰

Im Falle der ext. Brennstoffzufuhr durch wandseitigen Gaseinlass würde eine Vergrößerung des Wandabstandes Δ_{SOL} den benötigten von der Wand startenden Zufluss der ext. Brennstoffzufuhr mit erhöhen, da ein geringerer Anteil der startenden Neutralen ins zu erreichende Kernplasma vordränge. Dies gälte insbesondere im Falle hoher Temperaturen sowie Dichten im SOL, d.h. hoher Neutralen-Abschirmung bzw. niedriger -Opazität. Für das ferner untersuchte Pellet-Injektionssystem dürfte dieser Aspekt jedoch kaum relevant sein.⁵¹

Globale Nettoerosion

Zunächst wird die wichtigste aller studierten Kenngrößen betrachtet, i.e. die primäre, globale, mittlere *Nettoerosionsrate*, welche sich im Falle diffusiven sowie konvektiven SOL-Transports einstellt, als Funktion des mittleren Wandabstands Δ_{SOL} .

Abb. 6.8 zeigt die Ergebnisse der Studien. Die horizontalen Linien entsprechen den Erosionsraten, bei denen ein 10 %-Abtrag der obersten Wolframschicht der ersten Wand, zeitgleich mit dem vorgesehenen Austausch des Blankets erfolgt.

Das bedeutet, dass die *effektive Lebensdauer* des Starter- bzw. Nachfolgeblankets für Datenpunkte, die unterhalb dieser Linien liegen, nicht durch PWW begrenzt wäre; die in der EFDA-Roadmap zur Realisierung von Fusionsstrom (EFDA-Roadmap) vorgesehenen *Austauschintervalle* der Blankets beim Plasmabetrieb würden somit erreicht.

Für die farbcodiert dargestellten Testfälle wurde zwischen diffusivem (Kreise) und konvektivem (Rauten) Senkrecht-Transport unterschieden. Die drei Tokamak-Testfälle zeichnen sich durch verschiedene Separatrix- sowie Pedestaldichten und -temperaturen aus.

⁵⁰Tab. 6.1 lässt erwarten, dass dieser Effekt nicht bei den drei Tokamak-Fällen sondern ausschließlich beim SF beobachtet werden dürfte.

⁵¹Der Nettoanteil an wandseitig startendem Pellet-Brennstoff, der im Kernplasma ionisiert wurde, lag stets bei mehr als 95,5 %.

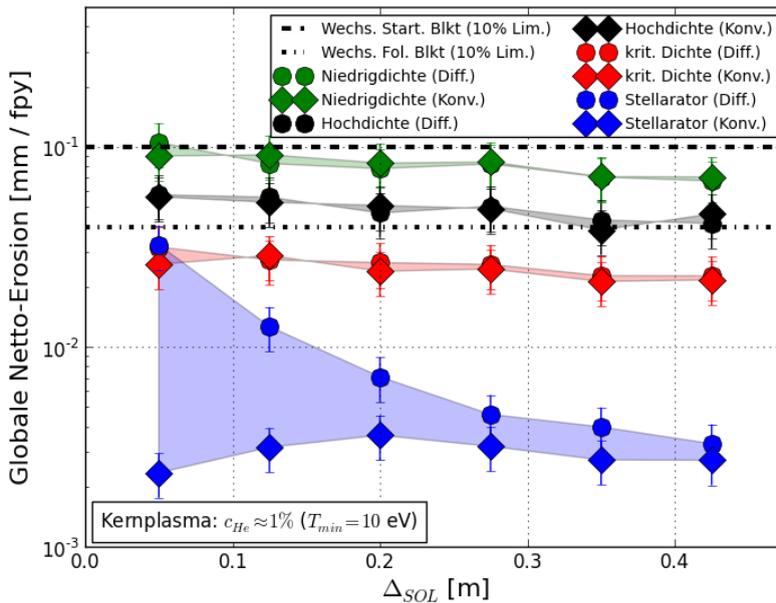


Abbildung 6.8.: Primäre, globale, mittlere *Nettoerosionsrate* vs. mittlerer Wandabstand Δ_{SOL} ; gerechnet mit CELLSOR und CELLSOR ERO.⁵²

Tokamak-Testfälle

Abb. 6.8 zeigt deutlich, dass in den Tokamak-Testfällen

1. keine signifikanten Unterschiede zwischen diffusivem und konvektivem Transport senkrecht zu den magn. Feldlinien zu erkennen waren,⁵³
2. die charakteristischen Unterschiede der verschiedenen Testfälle eine deutlich stärkere Wirkung auf die Erosionsrate der ersten Wand hatten als Variationen des Wandabstandes Δ_{SOL} .

Die Nettoerosionsrate konnte durch kleinere Unterschiede der Pedestaldichte sowie -temperatur auf ein Viertel reduziert werden. Die Pedestaldichte war beim KDF gegenüber dem NDF um 35 % angehoben (die Separatrixdichte um 33,3 %), während die Pedestaltemperatur um 32,6 % reduziert war.

Die Verbreiterung des SOL ($\Delta_{SOL} : 5 \rightarrow 42,5$ cm) führte dagegen - für jeden der drei Tokamak-Fälle - zu einer stetigen und schwachen Abnahme der Erosionsrate.

Eine effektive Reabschirmung des SOL gegenüber Ped.-Neutralen mit Energien von mindestens 1000 eV konnte dabei nicht erzielt werden.

⁵²Die Fehlerbalken entsprechen dem statistischen Fehler der MC-Rechnungen (berechnet nach Gl. 3.28 - 3.29 des EIRENE-Handbuchs [120]).

⁵³Dies lag daran, dass in beiden Transportfällen die Transportstärken zu einer ähnlichen Gesamtteilchenbilanz in der Brennkammer führten. Dies wurde dadurch sicher gestellt, dass die Werte für D_{\perp} und v_{\perp} vorab so geschätzt wurden, dass im Kernplasma galt: $c_{He} \approx 1\%$; Abb. 6.5.

Die Ursache für die fehlende Reabschirmung gegen keV-Ped.-Neutrale liegt darin, dass die mittlere freie Weglänge für CX-Stöße, i.e.

$$\lambda_{mf_{PCX}} = \frac{v_n}{n_i \langle \sigma v_n \rangle_{CX}(n, T)}, \quad (6.3)$$

im kalten und wenig dichten SOL-Plasma $\lambda_{mf_{PCX}} \gg 1$ m betrug (Abb. 6.7).⁵⁴

Im NDF führte der Schritt

- $\Delta_{SOL} : 5 \rightarrow 20$ cm zu einer Reduktion der Erosionsrate von $105 \rightarrow 78 \mu\text{m}/\text{fpy}$ (Reduktion um 26 %),⁵⁵
- $\Delta_{SOL} : 5 \rightarrow 42, 5$ cm zu einer Reduktion der Erosionsrate von $105 \rightarrow 68 \mu\text{m}/\text{fpy}$ (Reduktion um 35 %).

Im Falle des Starterblankets würde der NDF mit $\Delta_{SOL} \geq 20$ cm ausreichen, während für das Nachfolgeblicket eine erhöhte Pedestaldichte, welche knapp oberhalb des *Greenwald-Limits* läge, nötig wäre. Dies würde einem Zwischenfall entsprechen, i.e. mit $n_{ped} \approx 1,05 n_{GW}$ zwischen den Parameterwerten des HDF und des KDF.

Um einen Tokamak-DEMO1 im NDF bei hinreichend reduzierter Erosion betreiben zu können, müsste

1. das *Confinement*, i.e. die Einschlussgüte des Kernplasmas, reduziert werden;
 - eine Reduktion des Energieeinschlusses sowie des Pedestaldrucks würde zu einer verminderten Pedestaltemperatur führen, i.e. zu weniger keV-Ped.-Neutralen;
 - dies könnte über das *Plasma-Shaping* erreicht werden,⁵⁶ i.e. über die Stärke der vertikalen Plasmaelongation κ_x sowie -triangularität δ_X am *x-Punkt*.
2. die Stärke der Transportparameter (D_{\perp}, v_{\perp}) gegenüber den in Tab. 6.1 dargestellten deutlich reduziert werden,⁵⁷ wodurch die Heliumkonzentration im Kernplasma entsprechend erhöht würde.
 - Dies würde zu verringerten Raten, mit denen Ionen durch das Kernplasma und den SOL strömen, führen, sodass mit geringeren Raten Brennstoff durch das *Fuelling* ins heiße Pedestal eingetragen würde. Dies würde zu einer Reduktion der Gesamterosion im Hauptraum durch keV-Ped.-Neutrale führen.

Zu 2.: in der Praxis lässt sich der Senkrecht-Transport nicht frei einstellen. Er stellt eine Folge der Einschlussgüte im Kernplasma dar. Ein solches Feedback wurde im Rahmen dieser Studien nicht modelliert.

Stellaratorfall

Anders als bei den Tokamak-Fällen zeigte der SF eine erhöhte Sensitivität der Erosionsrate auf den Parameter Δ_{SOL} .

⁵⁴Für eine hinreichende Reabschirmung gegen keV-Ped.-Neutrale müsste die mittlere Dichte im 10 eV kalten SOL $\bar{n}_{i,SOL} \geq 10^{19} \text{ m}^{-3}$ betragen. Beim SF war dies der Fall; Abb. 6.6.

⁵⁵Nach Wenninger *et al.* wird für DEMO1 zur Reduktion der Wärmelasten der ersten Wand ein mittlerer Wandabstand von $\Delta_{SOL} \geq 20$ cm - nach aktuellem *Baseline-Design* - anvisiert.[155]

⁵⁷Die Auswirkungen eines reduzierten *Confinements* werden in Kap. 6.7.4 diskutiert.

⁵⁷Für den Paralleltransport, i.e. zur Reduktion von τ_{\parallel} , müsste unter Umständen ferner die Mach-Zahl M reduziert werden.

Aufgrund der im Mittel etwa zehnfachen Verbindungslänge zwischen oberer Mittelebene und den Divertor-Targetplatten (parallel zu magn. Feldlinien) führten auch schwache Transportparameter zu einem erhöhten Wandrecycling sowie zu einem erhöhten Ionenfluss, der durch die Beschleunigung in der Schicht schädigende Ionen auf die erste Wand prallen ließ.

Dadurch zeigte sich hier im diffusiven Transportfall eine deutliche Reduktion der Erosionsrate von $32 \rightarrow 4,6 \mu\text{m}/\text{fpy}$ (Reduktion um 86 %) für den Schritt $\Delta_{\text{SOL}} = 5 \rightarrow 28 \text{ cm}$.⁵⁸

Dieses Verhalten zeigte sich nicht im Falle konvektiven Transports, da dies der einzige untersuchte Fall war, bei dem für $\Delta_{\text{SOL}} \leq 10 \text{ cm}$ eine erhebliche Selbstheilung der Bruttoerosion durch prompte Redeposition erfolgte.⁵⁹

Der Schritt $\Delta_{\text{SOL}} = 5 \rightarrow 28 \text{ cm}$ führte zwar auch hier zur Reduktion des Ionenflusses auf die erste Wand sowie zur Reduktion des Wandrecyclings, gleichzeitig wurde jedoch die prompte Redeposition von $98 \rightarrow 10 \%$ reduziert.

Im SF konnte aufgrund der hohen Separatrix- und SOL-Dichten (kein *Greenwald-Limit* beim Stellarator) für sämtliche Wandabstände $5 \leq \Delta_{\text{SOL}} \leq 42,5 \text{ cm}$ eine effiziente Reabschirmung des SOL gegenüber den keV-Ped.-Neutralen beobachtet werden.⁶⁰

Dies führte dazu, dass die Nettoerosionsraten stets $\ll 40 \mu\text{m fpy}^{-1}$ waren, i.e. dass die *Mindestlebensdauer* beider Blankets für sämtliche Wandabstände $\Delta_{\text{SOL}} \geq 5 \text{ cm}$ klar erreicht würde.

Neutralen-Abschirmung im SOL

In der Interpretation der in Abb. 6.8 dargestellten Nettoerosionsraten wurde die Fähigkeit des SOL D-T-Neutrale abzuschirmen angeführt.⁶¹

Reabschirmung gegen Pedestal-Neutrale im SOL

Die Reabschirmung des SOL gegen Pedestal-Neutrale sowie die daraus resultierende Reopazität sind wichtige Kennzahlen zur Charakterisierung des SOL im Kontext der PWW. Aufgrund des konstanten Bedarfs des Kernplasmas an *ext. Brennstoffzufuhr* bleibt bei sämtlichen betrachteten Konfigurationen stets die Anzahl an im Pedestal geborenen Neutralen nahezu gleich; abzüglich der Unterschiede im Recyclingfluss, der ins Kernplasma vordringt. Das bedeutet, dass eine effiziente Reabschirmung gegen Pedestal-Neutrale einen *wichtigen Schutzmechanismus* der ersten Wand darstellt.

Abb. 6.9 zeigt die Reabschirmungsfähigkeit des SOL, welche in allen Testfällen *stetig* und deutlich mit dem Wandabstand Δ_{SOL} anwuchs.⁶²

Abb. 6.7 zeigte jedoch bereits, dass in den Tokamak-Fällen die Dichtelevel im SOL nicht ausreichten, um gegen keV-Ped.-Neutrale abzuschirmen.

Ferner zeigte Abb. 6.8 für größere Δ_{SOL} nur eine sehr schwache, stetige Reduktion der mittleren Nettoerosionsraten. Abb. 6.7 zeigte jedoch weiterhin, dass die hohen Dichten im Pedestal selbst ausreichten, um den SOL gegenüber den *keV-Ped.-Neutralen* abzuschirmen.

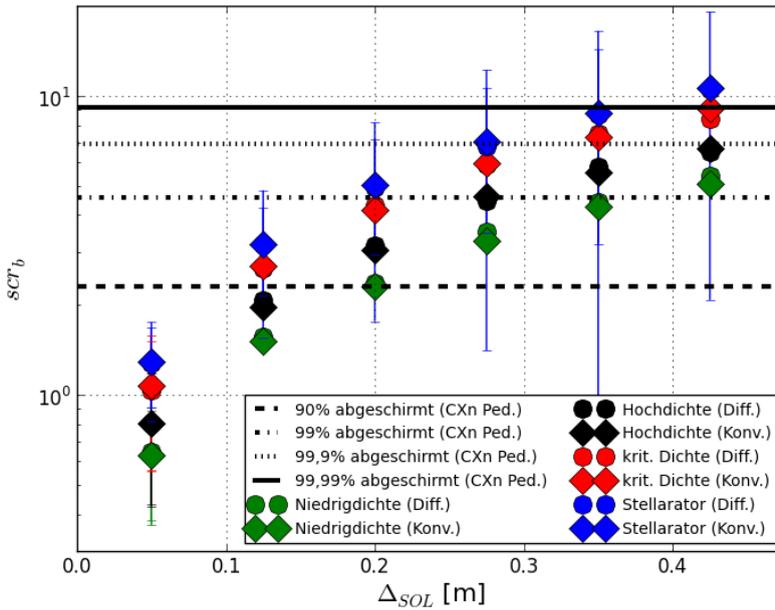
⁵⁸Die Quasisättigung der Erosionsrate ab $\Delta_{\text{SOL}} = 28 \text{ cm}$ trat ein, da auf Grund des erhöhten Wandabstandes, der Ionen- sowie Recyclingfluss derart reduziert wurde, dass die Primärerrosion fast ausschließlich durch im Pedestal durch CX-Stöße freigesetzte Brennstoffatome (Ped.-Neutrale) verursacht wurde (wie in den Tokamak-Fällen).

⁵⁹Siehe Kap. 6.7.2.

⁶⁰Kap. 6.7.2.

⁶¹Die Neutralen-Abschirmung wächst mit dem Kehrwert der Summe der mittleren freien Weglängen für CX- und Ionisationsstöße an. Aus der Abschirmung *Scr* folgt die Opazität $op = \exp(-Scr)$, d.h. die Neutralen-Durchlässigkeit im SOL, welche beim *Fuelling*, also in Richtung Kernplasma möglichst hoch, dagegen beim Schützen der ersten Wand, also vom Kernplasma zur ersten Wand, möglichst niedrig sein sollte; Kap. 3.2.6.

⁶²Die Stetigkeit der Reabschirmung lässt sich auch an der Reopazität (Abb. A.3) ablesen, welche die Durchlässigkeit des SOL für *keV-Ped.-Neutrale* angibt.

Abbildung 6.9.: Neutralen-Reabschirmung scr_b im SOL.

Ein Großteil der im Pedestal geborenen Neutralen durchläuft vor dem Überqueren der Separatrix Kaskaden von CX-Stößen, sodass die häufigsten Energien um einige 100 eV verteilt sind. Zurück zu Abb. 6.9:

1. im NDF wurden 90% der D-T-Ped.-Neutralen durch Ionisations- bzw. CX-Stöße im kalten Plasma des SOL, ab einem Wandabstand von $\Delta_{SOL} = 20$ cm, abgeschirmt.
 - Eine Reabschirmung gegen 99 % konnte ab einem Wandabstand $\Delta_{SOL} > 35$ cm beobachtet werden.
2. Im HDF reichten dazu bereits 28 cm Wandabstand aus.
3. Im NDF wurde die Reabschirmung höchstens so gut ($\Delta_{SOL} = 42,5$ cm), dass ca. jedes hundertste Ped.-Neutrale ohne weitere Stöße im SOL auf die erste Wand auftraf; im KDF (≈ 33 % höhere Separatrixdichte) sogar nur jedes zehntausendste. Der KDF zeigte jedoch nicht um das 100-fache reduzierte Erosionsraten, sondern um das 4-fache (Abb. 6.8).

Abb. 6.8 zeigte bereits, dass die globale Erosionsrate in den Tokamak-Testfällen - insbesondere ab $\Delta_{SOL} = 20$ cm - näherungsweise einer Sättigung in Δ_{SOL} unterlag, während die Reabschirmung gemäß Abb. 6.9 stetig mit Δ_{SOL} anwuchs. Dieses Verhalten deutet auf einen dominanten Schadensbeitrag extrem hochenergetischer Ped.-Neutraler hin, welche selbst bei starker genereller Reabschirmung, i.e. $scr_b \gg 5$, nahezu unabgeschirmt auf die erste Wand prallen.

Zerstäubungsausbeute durch Pedestal-Neutrale

Die Reabschirmung (Abb. 6.9) sowie -opazität (Abb. A.3) geben zwar Aufschluss über den Anteil an ungehindert vom Pedestal auf die Wand treffenden Neutralteilchen.

Die reale Schädigung der ersten Wand, welche durch die wenigen, unabgeschirmten, hochenergetischen *Ped.-Neutralen* zuzufügt wird, wird von der allgemeinen Reabschirmung nicht notwendigerweise erfasst.

Zur Abschätzung der ZA'en aller *Ped.-Neutraler* wurden für die Testfälle aus Tab. 6.1 während der MC-Rechnung für alle Neutralen, die innerhalb der Separatrix, d.h. im Kernplasma und insbesondere im Pedestal durch einen CX-Stoß freigesetzt wurden, die mittleren ZA'en beim Wandausprall gezählt.⁶³

Aus den Daten müsste sich einerseits die Stärke der Reabschirmung in Abhängigkeit des Wandabstandes Δ_{SOL} ableiten lassen sowie andererseits der Mindestabstand, ab dem eine Reduktion in Y_{ped} einträte.

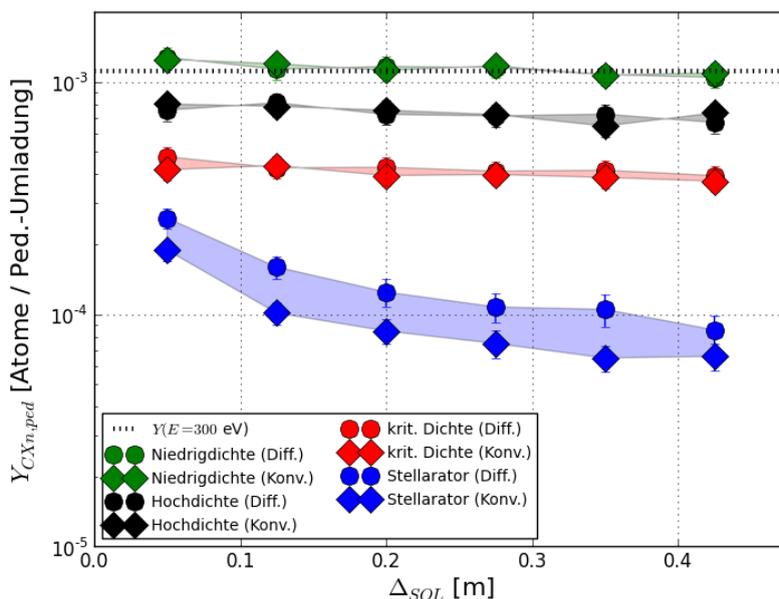


Abbildung 6.10.: Mittlere durch *Pedestal-Neutrale* hervorgerufene Zerstäubungsausbeute (ZA).

Abb. 6.10 zeigt die mittlere ZA durch *Ped.-Neutraler*.⁶⁴ Die horizontale gestrichelte Linie gibt die ZA von D-T-Neutralen (gemittelt über D + T) mit $E = 300 \text{ eV}$ (entsprechend der Separatrixtemperatur) an.⁶⁵

Trotz der stetig wachsenden Reabschirmung im SOL zeigt die mittlere ZA durch *Ped.-Neutraler* ein ähnliches (Sättigungs-)Verhalten wie die globale Erosionsrate (Abb. 6.8).

Dies deutet darauf hin, dass der geringe Anteil an unabgeschirmten, hochenergetischen *Ped.-Neutralen* den Hauptanteil der Zerstäubung ausmacht.

Beim SF führten die höheren Dichteelevel im SOL dazu, dass mit zunehmendem Δ_{SOL} auch die für den Wandschaden dominierenden *Ped.-Neutralen* reabgeschirmt wurden. Abb. 6.10 zeigt hier deutlich die stetige Abnahme der ZA durch *Ped.-Neutraler* mit wachsendem Δ_{SOL} .

⁶³Im Falle der Ionisation wurde also $Y_i = 0$ addiert und im Falle einer finalen Umladung in kälteren Plasmabereichen wiederum das zugehörige (und geringere) $Y_i(E_{kalt})$ ausgewertet.

⁶⁴Abb. A.4 zeigt den Anteil an keV-*Ped.-Neutralen* als Funktion von Δ_{SOL} . Die Kurven verlaufen nahezu identisch zu den erzielten ZA'en, welche in Abb. 6.10 dargestellt sind.

⁶⁵Die ZA wurde anhand der *Fitformel von Eckstein*[36] für normalen Einfallswinkel berechnet.

Energieverteilung der auf die Wand prallenden Neutralen

Die Anteile der keV-Ped.-Neutralen (Abb. A.4) sind nahezu deckungsgleich zu den Kurvenverläufen der ZA'en (Abb. 6.10) durch Ped.-Neutrale, i.e. der Wandschaden wurde in den Tokamak-Testfällen vorwiegend durch Ped.-Neutrale mit $E \geq 1$ keV verursacht, während die Reabschirmung des SOL (Abb. 6.9) mutmaßlich vorwiegend gegen die Ped.-Neutralen mit $E \ll 1$ keV erfolgte.

Beim SF reichte wiederum die Reabschirmung des SOL auch für Pedestal-Neutrale mit $E \geq 1$ keV aus. Die Bedingung $\lambda_{mfpcx} \leq \Delta_{SOL}$ (Gl. 6.2) zur signifikanten Reabschirmung gegen keV-Ped.-Neutrale wurde typischerweise nur dann erfüllt, wenn für die mittlere Ionendichte im SOL $n_i \geq 10^{19} \text{ m}^{-3}$ galt; Abb. 6.6 und Abb. A.2.

Abb. 6.11 zeigt die Histogramme der relativen Häufigkeit von Energien der auf die erste Wand prallenden Neutralen im NDF sowohl im Falle schwacher ($\Delta_{SOL} = 5$ cm) als auch starker Reabschirmung ($\Delta_{SOL} = 42,5$ cm).

Die Energieverteilung der auf die Wand treffenden Neutralen war nahezu identisch, i.e. unabhängig vom Wandabstand Δ_{SOL} .

Ganz anders stellt sich dies im SF dar, bei dem bereits Abb. 6.10 eine stetige Abnahme der Zerstäubung mit Δ_{SOL} zeigte. Abb. 6.12 zeigt eine deutlich zu niedrigen Energien hin verschobene Wahrscheinlichkeitsverteilung für auf die Wand prallende D-T-Neutrale.

Für $\Delta_{SOL} = 42,5$ cm trafen deutlich mehr Neutrale mit $E \leq 30$ eV auf die erste Wand, während für nahezu sämtliche weitere Energieintervalle im Bereich $E \leq 3$ keV für $\Delta_{SOL} = 5$ cm deutlich mehr aufprallende Neutrale gezählt wurden. Insbesondere Neutrale mit $E = 90 - 500$ eV konnten für $\Delta_{SOL} = 42,5$ cm stark bis teilweise vollständig abgeschirmt werden. Die Reabschirmung im SOL geschah natürlich auch für Ped.-Neutrale mit $E \leq 90$ eV. Diese setzten durch CX-Stöße im kalten SOL Neutrale im selben Energiebereich frei, jedoch vorwiegend mit $E \leq 30$ eV.

Für $E \geq 3$ keV gab es keine systematischen Unterschiede zwischen den Fällen $\Delta_{SOL} = 5$ bzw. $42,5$ cm.

Abb. A.4 zeigt, dass zwischen den einzelnen Testfällen deutliche Unterschiede vorlagen. Der Anteil an aufprallenden Neutralen mit $E \geq 1$ keV,

- variierte zwischen 0,4 % (SF, $\Delta_{SOL} = 42,5$ cm, konvektiver Transport)
- und 9,4 % (NDF, $\Delta_{SOL} = 5$ cm, diffusiver Transport),

i.e. dem 23,5-fachen.

1. Insbesondere die unterschiedlichen Pedestaltemperaturen führten dazu, dass der Anteil an keV-Ped.-Neutralen zwischen den drei Tokamak-Testfällen variierte; beim Wechsel zum Testfall mit höherer Dichte wurde dieser Anteil im Mittel um das $\approx 1,7$ -fache reduziert.
2. Beim SF konnte der Anteil der keV-Ped.-Neutralen, durch den Schritt $\Delta_{SOL} = 5 \rightarrow 42,5$ cm, um das 4-fache reduziert werden.

Zweiteres war auf die höhere Dichte im Pedestal sowie SOL und nicht auf die Pedestaltemperatur zurückzuführen, da diese innerhalb des SF (Vergleich beider Histogramme in Abb. 6.12) - anders als Δ_{SOL} - konstant blieb.

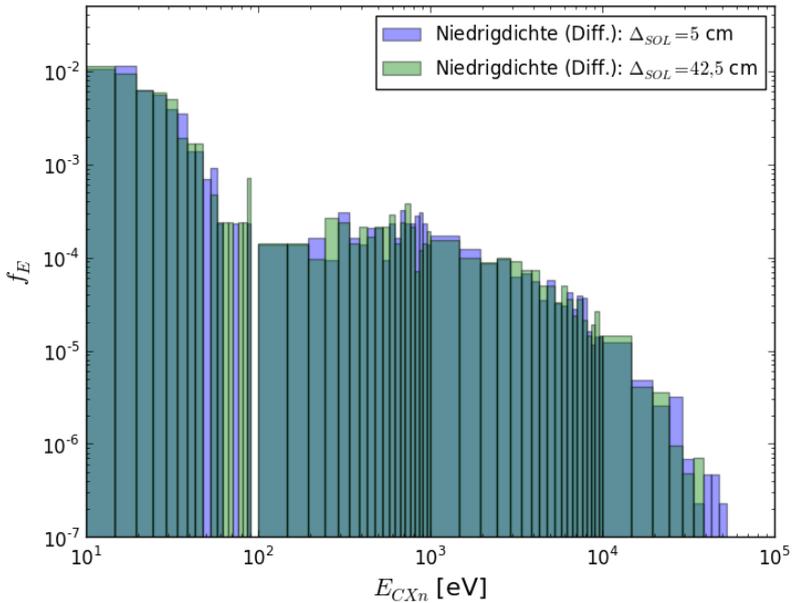


Abbildung 6.11.: Wahrscheinlichkeitsdichte f_E von auf die Wand prallenden D-T-Neutralen im doppelt-logarithmischen Histogrammplot; im NDF geprägt durch diffusiven Transport, für $\Delta_{SOL} = 5$ cm sowie $\Delta_{SOL} = 42,5$ cm.

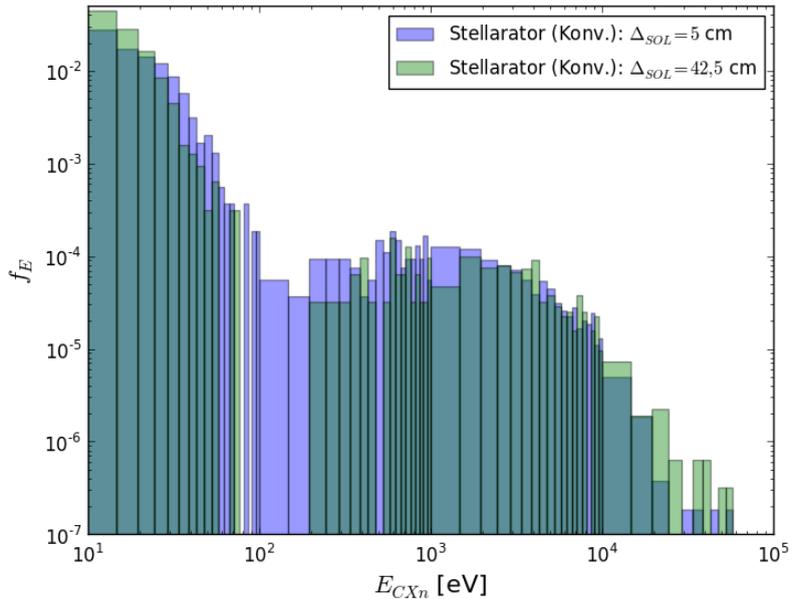


Abbildung 6.12.: Wahrscheinlichkeitsdichte f_E von auf die Wand prallenden D-T-Neutralen im doppelt-logarithmischen Histogrammplot; im SF geprägt durch konvektiven Transport, für $\Delta_{SOL} = 5$ cm sowie $\Delta_{SOL} = 42,5$ cm.

Externer Brennstoffzufluss

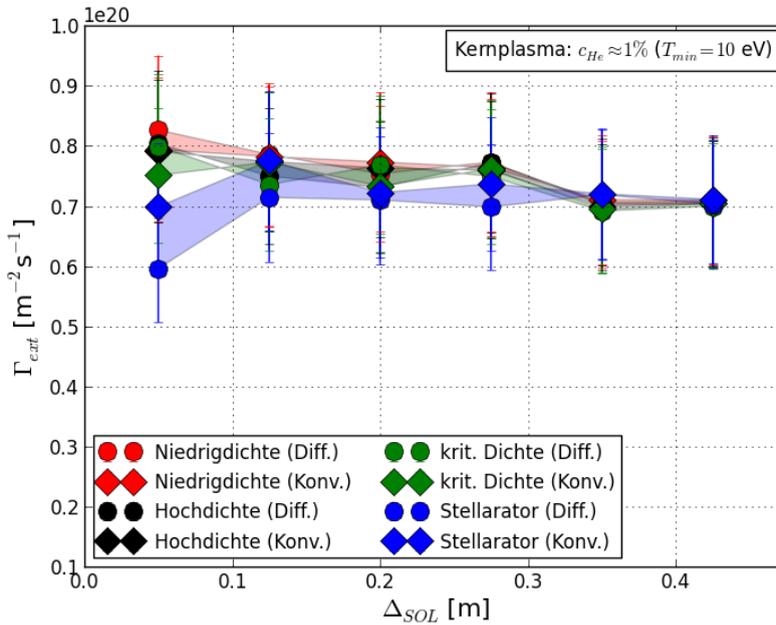


Abbildung 6.13.: Externer Brennstoffzufluss Γ_{ext} durch Pelletinjektion vs. mittlerer Wandabstand Δ_{SOL} .

Ein möglicherweise nachteiliger Effekt von erhöhten Wandabständen Δ_{SOL} könnte die Zunahme des benötigten wandseitigen Zuflusses der *ext. Brennstoffzufuhr* darstellen. Dies wäre insbesondere für ein Gaszufuhrsystem erwartet worden.⁶⁶

Bei Pelletinjektion zeigt Abb. 6.13 jedoch, dass in den Tokamak-Testfällen die Menge der *ext. Brennstoffzufuhr*, im Rahmen der statistischen Fehler sowie abweichenden, a priori geschätzten Transportstärken, unabhängig vom mittleren Wandabstand Δ_{SOL} war, da der Anteil des im Kernplasma ionisierten Brennstoffs, aufgrund der schwachen Dichteabhängigkeit der Ablationsraten, stets größer als 95,5 % war (Anh. A.5).

Propmpte Redeponition von erodiertem Wolfram

Abb. 6.14 zeigt den Anteil prompt redeponierender, erodierter Wolframatomte als Funktion des Wandabstandes Δ_{SOL} .⁶⁷

⁶⁶Ein solcher Effekt wäre einer verstärkten Senke durch Ionisation im verbreiterten SOL zuzuschreiben, welche aufgrund des vorgegebenen Temperaturprofils und der Modellannahmen zustande käme, da die Teilchenmenge im SOL insgesamt durch den parallelen *Abtransport* für einen breiteren SOL erhöht wurde.

⁶⁷Abschätzung der Größenordnung des Gyrationradius ρ_{GW} : startet ein Wolframatom aus dem Maximum einer Thompson-Verteilung (TV), bei der die Erosion durch D-Projektile mit einer Energie von 100 eV hervorgerufen wurde (Abb. B.1), i.e. mit $E = 5\text{ eV}$ bzw. $v \approx 2300\text{ ms}^{-1}$, dann gilt für den Gyrationradius im Magnetfeld der Stärke $B = 7\text{ T}$, unter der Annahme, dass die Ionisation durch einen elastischen Stoß hervorgerufen wurde, dass $\rho_{GW} = m_W v \cdot (eB)^{-1} \approx 624\text{ }\mu\text{m}$.

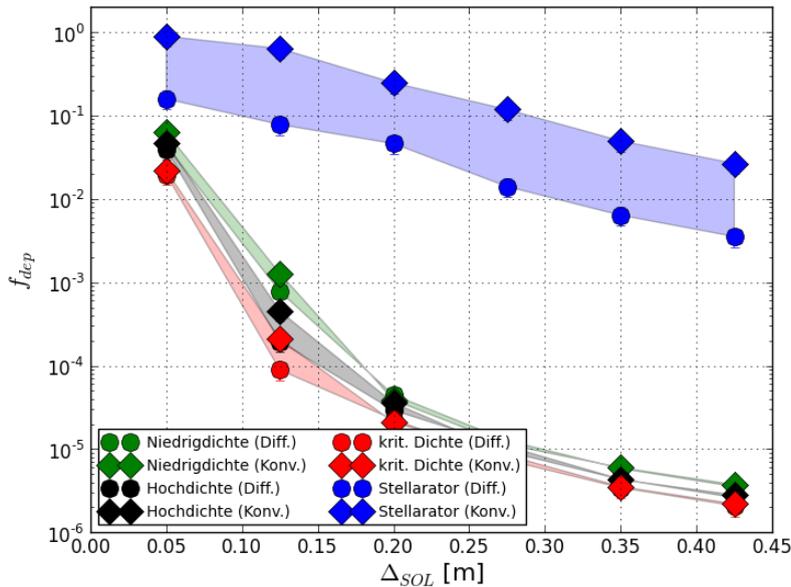


Abbildung 6.14.: Anteil *prompter Redeposition*⁶⁸ f_{dep} vs. mittlerer Wandabstand Δ_{SOL} ; gerechnet mit CELLSOR ERO (Kap. 4.4.3, Gl. 4.65 - 4.66).

1. Bei den Tokamak-Testfällen lag der *prompte Redepositionsanteil* bei geringem Wandabstand ($\Delta_{SOL} = 5$ cm) bei $1,7\% \leq f_{dep} \leq 7\%$ (KDF, NDF).
 - Der *prompte Redepositionsanteil* fiel ab $\Delta_{SOL} \geq 10$ cm in den Promillebereich ab, i.e. es existierte kein signifikanter *Selbstheilungsmechanismus* der ersten Wand.
 - Dies erklärt das Sättigungsverhalten der globalen Nettoerosionsraten (Abb. 6.8) ab $\Delta_{SOL} \geq 10$ cm.
2. Im SF mit konvektivem Transport führte die Ausbildung einer breiten *Dichte-Schulter* bis dicht vor die Wand hingegen dazu, dass insbesondere für kleine Wandabstände, i.e. $\Delta_{SOL} \leq 12,5$ cm, nahezu sämtliche primär erodierten Wolframotope *prompt redeponierten*, i.e. $0,98 \geq f_{dep} \geq 0,7$.
 - Dieser Anteil konnte ab $\Delta_{SOL} \geq 28$ cm auf $f_{dep} \leq 0,1$ reduziert werden.
3. Im SF mit diffusivem Transport: $f_{dep} = 0,16$ bei $\Delta_{SOL} = 5$ cm.

Punkt 2. erklärt den in Abb. 6.8 beobachteten Trend, dass die globale Nettoerosionsrate im SF bei konvektivem Transport zunächst für wachsendes Δ_{SOL} - im Kontrast zu den Tokamak-Testfällen - leicht zunahm; nur im SF lag eine signifikante *Selbstheilung* der ersten Wand durch *prompte Redeposition* bei geringen Wandabständen, i.e. bei $\Delta_{SOL} \leq 10$ cm, überhaupt vor. Die Fähigkeit zur *Selbstheilung* ging für größere Wandabstände auch beim SF nahezu vollständig verloren.

⁶⁸Damit es zur *prompten Redeposition* von erodierten Wolframotomen kommt, muss gelten, dass die Wegstrecke bis zur Ionisation innerhalb des Gytrationsradius von einfach ionisiertem Wolfram liegt, i.e. im Mittel muss die Ungleichung $\lambda_{mf_{piz}} \leq \rho_{GW}$ erfüllt sein (Kap. 3.2.7 und 3.4.3).

Schadenskanäle der Bruttoerosion

Zur Darstellung der Schadensbeiträge (der Zerstäubung) durch

1. in der Debye-Schicht auf die erste Wand beschleunigte Ionen (D,T,He,N,W),
2. im Pedestal *umgeladene Neutrale des Wandrecyclings* (**Rec.-CXn**, mutmaßlich relevant bei geringen Wandabständen Δ_{SOL}),
3. im Pedestal *umgeladene Neutrale der ext. Brennstoffzufuhr* (**Pel.-CXn**),

wurde die kumulierte Bruttoerosion nach diesen drei Schadenskanälen aufgeteilt. Abb. 6.15 zeigt für den SF, dass für geringe Wandabstände $\Delta_{SOL} = 5$ cm die Beiträge des *Ionenflusses auf die erste Wand* (17%), als auch des betragsgleichen *Wandrecyclings* (52%, durch Rec.-CXn) zusammen für 69% der globalen Bruttoerosion der ersten Wand verantwortlich sind.

Bereits ab einer Vergrößerung des Wandabstandes von $\Delta_{SOL} = 5 \rightarrow 10$ cm lässt sich jedoch der Ionen- sowie Recyclingfluss derart reduzieren, dass die Hälfte der Bruttoerosion den Pel.-CXn zuzuschreiben ist.⁶⁹

Bei $\Delta_{SOL} = 28$ cm ist der Schaden durch Pel.-CXn mit relativen 81% des Gesamtschadens mehr als vier mal so hoch wie der kumulierte Schaden durch Ionen und Recyclingsneutrale, wodurch sich das quasi-sättigende Verhalten der Nettoerosionsrate in Abb. 6.8 erklären lässt.

Abb. 6.16 zeigt im Kontrast zu Abb. 6.15 die relativen Anteil der Bruttoerosion nach Schadenskanälen exemplarisch für den Tokamak am diffusiven NDF.⁷⁰

Selbst bei geringem Wandabstand, i.e. $\Delta_{SOL} = 5$ cm, spielen sowohl *Rec.-CXn* als auch *aufprallende Ionen* für die Erosion keine bedeutende Rolle. Die Zerstäubung der ersten Wand ist hier bereits zu 93% auf die *Pel.-CXn* zurückzuführen. Dies deckt sich mit dem geringen Einfluss des Parameters Δ_{SOL} auf die globale Nettoerosionsrate, der sich in Abb. 6.8 zeigte.

⁶⁹Aufgrund des Erhalts der Fusionsleistung und Heliumkonzentration des Kernplasmas ist jene nahezu konstant in Δ_{SOL} , da die Ablationsmenge der wandseitig startenden Pellets auch für $\Delta_{SOL} = 42, 5$ cm noch zu > 94% innerhalb der Separatrix stattfindet.

⁷⁰Sowohl der HDF als auch der KDF sind in den Ergebnissen dieser Auswertung sehr ähnlich zum NDF. Auch bei konvektivem Transport zeigt sich (im NDF) ein zu Abb. 6.15 analoges Bild.

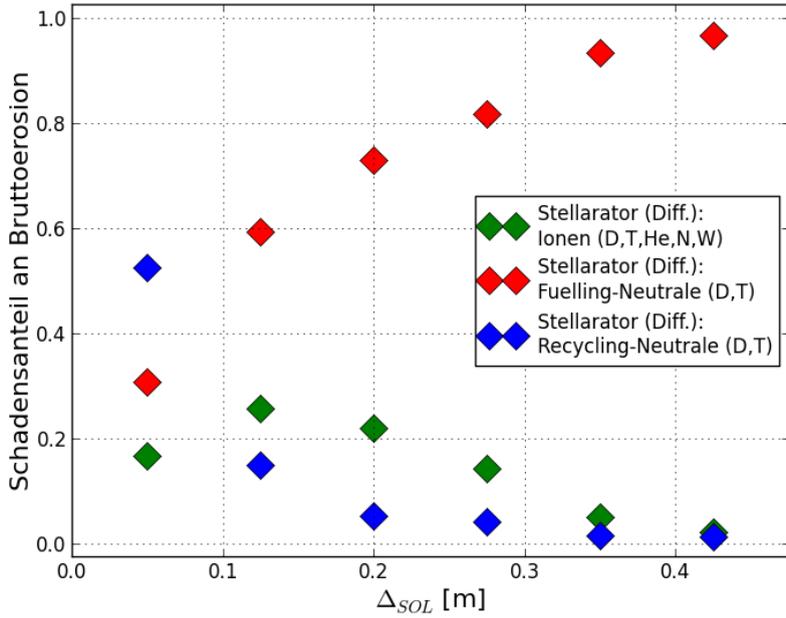


Abbildung 6.15.: Schadenskanäle nach relativen Anteilen im SF.

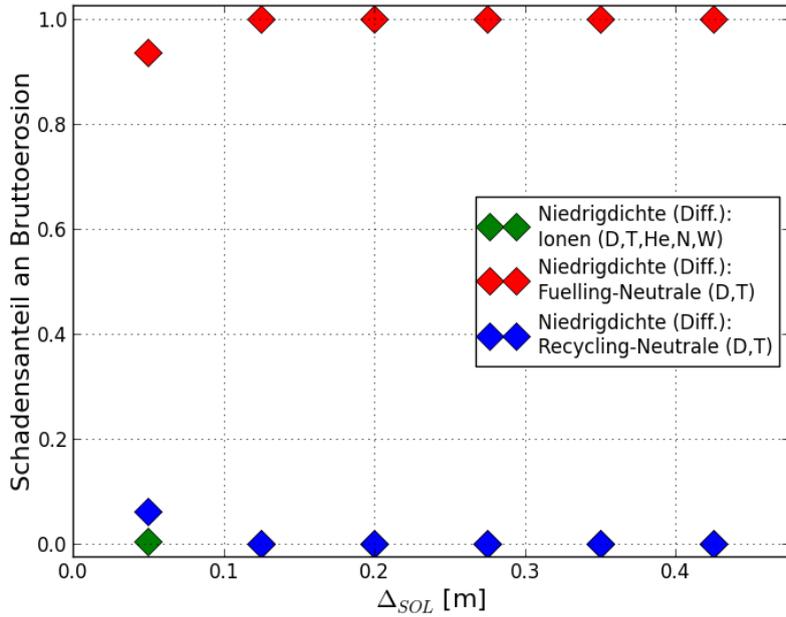


Abbildung 6.16.: Schadenskanäle nach relativen Anteilen im NDF.

6.7.3. Variation der Pelletgröße im Niedrigdichtefall

Die Ergebnisse der globalen Erosionsstudien zeigen klar (Abb. 6.8), dass aus Sicht der Erosionsrate, i.e. der PWW im Hauptraum der Brennkammer, Plasma-Szenarios mit möglichst hoher Pedestal- und Separatrixdichte, sowie daraus resultierend auch möglichst niedriger Pedestaltemperatur, zu Favorisieren sind.

Das *Greenwald-Limit* stellt jedoch eine empirische und unscharfe *Obergrenze der Pedestaldichte* dar, welche insbesondere aus Sicht der Plasmakontrolle mit einer Sicherheitsmarge unterschritten werden sollte. Abb. 6.8 zeigte, dass der NDF, der diese Bedingung erfüllt, aufgrund des heißen Pedestals höhere Nettoerosionsraten aufwies als die Tokamak-Testfälle mit höherer Pedestaldichte sowie niedrigerer -temperatur.⁷¹

Ein Ansatz zur Reduktion der Energien der Pel.-CXn trotz bei invarianter Pedestaltemperatur könnte sein, die Größe der injizierten Brennstoffpellets zu reduzieren und dadurch das Maximum der Pelletablation ins äußere Pedestal, ergo hin zu niedrigeren Temperaturen zu verschieben.

Im Rahmen des entwickelten Modells wird die Größe der Pellets antiproportional zur Injektionsfrequenz der Pelletkanone sowie proportional zum Brennstoff-Ionisationsbedarf des Kernplasmas bestimmt.

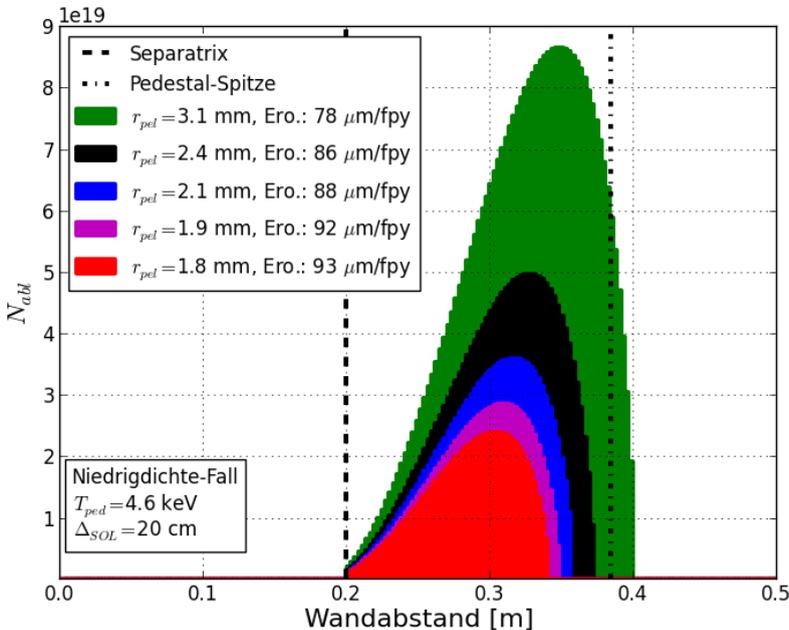


Abbildung 6.17.: Anzahl ablatierter Pelletmoleküle vs. Wandabstand im NDF; variiert wurde der Pelletradius r_{pel} implizit durch Variationen der Injektionsfrequenz ν_{pel} .

Abb. 6.17 zeigt die errechneten Ablationsprofile als Funktion des Wandabstandes Δ_{SOL} für verschiedene Pelletradien r_{pel} .

⁷¹Die Energieverteilung der Brennstoffneutralteilchen beim Wandaufprall wird durch die Temperatur im Pedestal bestimmt. Zu freisetzenden CX-Stößen kommt es vorwiegend durch Neutralteilchen, die im Zuge der *ext. Brennstoffzufuhr* ins Kernplasma eingebracht werden; dabei entstehen hochenergetische *Pel.-CXn* (aus dem Ionenhintergrund).

Der Standardfall mit $r_{pel} = 3,1$ mm entsprach einer Injektionsfrequenz von $\nu_{pel} = 20$ Hz.⁷² Das Maximum der Ablation konnte zwar durch die Injektion verkleinerter Pellets um bis zu 4 cm weiter in äußere und kältere Pedestalbereiche verschoben werden, dies führte allerdings - statt zur Reduktion - zum Anstieg der Nettoerosionsrate um $15 \mu\text{m fpy}^{-1}$. Dafür sind Veränderungen der durchlaufenen Kaskaden an CX-Stößen vor dem Austritt aus dem heißen Pedestal in den kalten SOL verantwortlich. Die Verlagerung der mittleren Eindringtiefen der injizierten Brennstoffpellets ins äußere Pedestal, führten aufgrund des Unterschreitens der freien Weglänge für CX-Stöße im Pedestal, zum Verlust des schützenden letzten CX-Stoßes am *kälteren Pedestalrand*; eine *ungünstige Energieverteilung* der *Pel.-CXn* sowie erhöhte Erosionsraten (im NDF) sind die Folge.

6.7.4. Reduktion der Pedestaltemperatur im Niedrigdichtefall

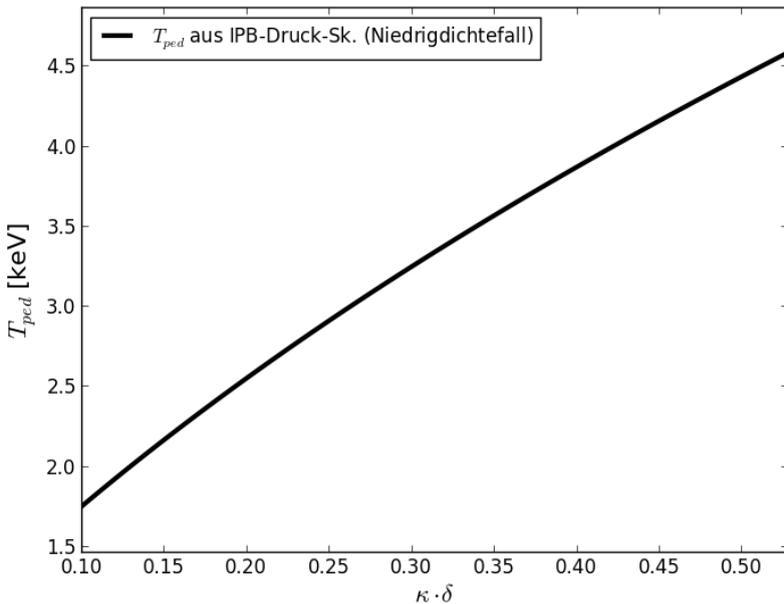


Abbildung 6.18.: Aus der *Pedestal-Druck-Skalierung* der *ITER-Physics-Basis* (IPB) resultierende Pedestaltemperatur für Variationen von $1 \leq \kappa \leq 1,59$ bzw. $0,1 \leq \delta \leq 0,33$ von $\kappa \cdot \delta$ im NDF.

Eine weitere Möglichkeit zur hinreichenden Reduktion der Erosion im NDF könnte durch eine Verringerung der Pedestaltemperatur über den Pedestaldruck optimiert werden.

Ein Weg dies zu erreichen könnte darin bestehen über das *Plasma-Shaping*, d.h. durch Verringern der Plasmaelongation κ und -triangularität δ , die Einschlussgüte der Energie (das *Confinement*) bzw. die Leistungsdichte im Kernplasma (die *Core Performance*) gegenüber dem *DEMO1-Baseline-Scenario* zu reduzieren.⁷³

⁷²Es gilt: $r_{pel} = 1,8$ mm $\Leftrightarrow \nu_{pel} = 100$ Hz; weitere Werte für ν_{pel} in Abb. 6.17: 40, 60, 80 Hz.

⁷³Alternativ könnte ein schwächeres *Confinement* auch über eine Verringerung des getriebenen Plasmastroms I_p erreicht werden. Der *Baseline Parameter* trägt den Wert $I_p = 19,6$ MA (Tab. 3.1); in die *Pedestal-Druck-Skalierung* der *ITER-Physics-Basis* geht der Plasmastrom mit quadratischer Potenz ein, i.e. $p_{ped} \propto I_p^2$. [33]

Dies würde zwar für eine konstante Fusionsleistung von $P_{Fus} = 2$ GW dazu führen, dass die Brennkammer- und Maschinegröße aufgrund des wachsenden Plasmaradius (a) vom *DEMO1-Baseline-Design* abweiche, dies wäre jedoch für die Betrachtungen der Plasmarandschicht und des SOL irrelevant und daher eher ein ökonomisches Problem.

Die Referenzwerte wurden ausgehend von jenen des *DEMO1-Baseline-Designs* für die Elongation $\kappa = 1,59$ sowie die Triangularität $\delta = 0,33$ schrittweise auf $\kappa = 1$ bzw. $\delta = 0,1$ reduziert.

Abb. 6.18 zeigt die errechnete Pedestaltemperatur für Variationen von $\kappa \cdot \delta$ im NDF. Aufgrund der Sensitivität der *Pedestaldruck-Skalierung* der IPB zu den Parametern des Plasma-*Shapings*: [33]

$$p_{ped} \propto \frac{\kappa^{3,62}}{\left(\frac{1+\kappa^2}{2}\right)} (1 + \delta)^{3,2}, \quad (6.4)$$

würde dies hypothetisch - unter Ausklammerung weiterer Implikationen die daraus resultierten - eine Reduktion der Pedestaltemperatur von $T_{ped} = 4,6 \rightarrow 1,75$ keV ermöglichen.

Diese Auswertung zeigt, dass es einen strategischen Lösungsansatz zum Schutz der ersten Wand an DEMO1 auch dann gäbe, wenn sich das *Greenwald-Limit* zukünftig als scharfe Grenze erwiese.

Auswirkungen auf die Erosionsrate

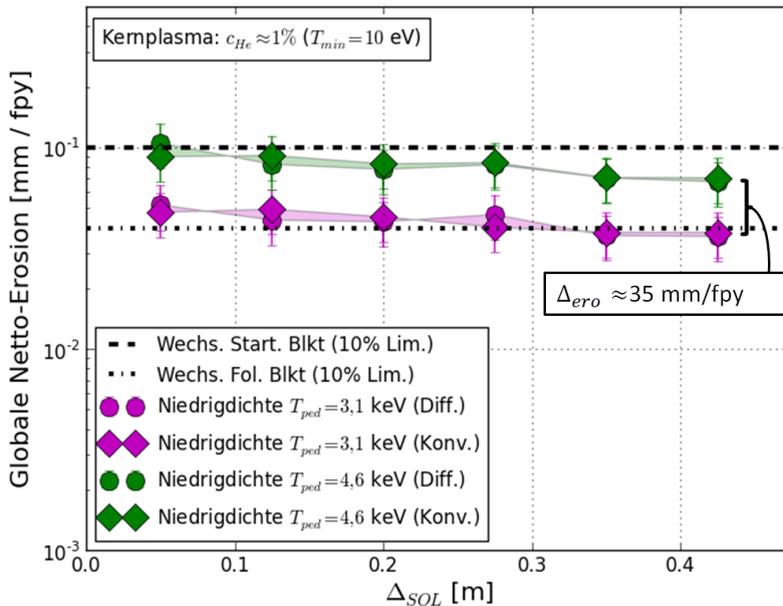


Abbildung 6.19.: Primäre global gemittelte Nettoerosionsrate vs. *Wandabstand* Δ_{SOL} ; NDF mit $T_{ped} = 3,1$ keV, berechnet mit CELLSOR und CELLSOR ERO.

Zum Studium der Auswirkungen auf die globale Erosionsrate wurde der NDF erneut mit CELLSOR berechnet, allerdings mit einer reduzierten Pedestaltemperatur wie beim KDF, i.e. $T_{ped} = 3,1$ keV ($\kappa = 1,3$, $\delta = 0,21$); dies entspräche einem Pedestaldruck von 37 kPa.

Die Rechnungen wurden mit denselben Werten der Transportparameter D_{\perp} und v_{\perp} wie zuvor (Tab. 6.1) für diffusiven sowie konvektiven Transport wiederholt.

Abb. 6.19 zeigt - analog zu Abb. 6.8 - die globale Nettoerosionsrate für verschiedene Wandabstände Δ_{SOL} im NDF; für $T_{ped} = 4,6$ sowie $3,1$ keV. Die Änderung der Nettoerosionsrate lag - je nach Wandabstand Δ_{SOL} - bei $\Delta_{ero} \geq 35 \text{ mmfpy}^{-1}$. Dabei zeigte der NDF für $T_{ped} = 3,1$ keV systematisch niedrigere Erosionsraten als bei $T_{ped} = 4,6$ keV.

Die Reduktion der Nettoerosion war ab einem Wandabstand von $\Delta_{SOL} = 20$ cm ausreichend, um die Lebensdauer der ersten Wand im NDF mindestens bis zum vorgesehenen Austausch des Nachfolgeblankets (ca. 5 fpy) zu erhöhen, i.e. ohne Abtrag der obersten 10% der Wolframschutzschicht der ersten Wand.

Ein Vergleich mit Abb. 6.8 zeigt aber auch, dass der KDF - trotz der identischen Pedestaltemperatur von $T_{ped} = 3,1$ keV - bei $\Delta_{SOL} = 20$ cm eine um ca. 41 % niedrigere Nettoerosionsrate aufwies. Dies dürfte sowohl an den niedrigeren Eindringtiefen in die heißen Pedestalzonen liegen, welche sich durch die höhere Pedestaldichte ergeben, als auch an der stärkeren Reabschirmung im separatrixnahen, dichteren SOL.

6.7.5. Analyse der Abschirmung gegen Neutrale des Wandrecyclings

Anders als beim Tokamak spielt beim SF auch die Abschirmung des SOL gegen *Rec.-CXn* eine Rolle. Ist diese Abschirmung hoch, so wird - anders als beim *Fuelling* - die Anzahl an im Pedestal durch CX-Stöße mit *Atomen des Wandrecyclings* freigesetzten *keV-Ped.-Neutralen* entsprechend geringer. Das *Wandrecycling* ist daher ausschließlich beim Stellarator und ferner bei geringen Wandabständen, i.e. $\Delta_{SOL} \leq 15$ cm (Abb. 6.15), von Bedeutung.

Zur Diskussion der physikalischen Unterschiede der Neutralen-Abschirmungen beim Tokamak bzw. Stellarator wurden folgende Testfälle ausgewählt:

1. der NDF des Tokamaks mit Diffusion (schwache Abschirmung),
2. sowie der SF mit Konvektion (starke Abschirmung).

Ionendichte im SOL

Abb. 6.20 zeigt die errechneten Ionendichten im SOL für einen mittleren *Wandabstand* von $\Delta_{SOL} = 20$ cm. Insbesondere im konvektiven SF ist die Ausprägung einer breiten *Dichte-Schulter* klar erkennbar.

Für den rein durch Diffusion geprägten Transportfall gilt im quellfreien Fall, dass die Abfalllänge der Ionendichte, i.e. $\lambda_{n_i} \approx \sqrt{D_{\perp} \tau_{\parallel}}$, durch die Diffusionskonstante D_{\perp} (senkrecht zu den magn. Feldlinien) sowie die mittlere Transport-Zeitkonstante τ_{\parallel} (parallel zu den magn. Feldlinien) bestimmt wird. Für den NDF mit Diffusion, i.e. $D_{\perp} = 0,019 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ sowie $\tau_{\parallel} \approx 16,3$ ms, folgt $\lambda_{n_i} \approx 1,8$ cm (NDF in Abb. 6.20).

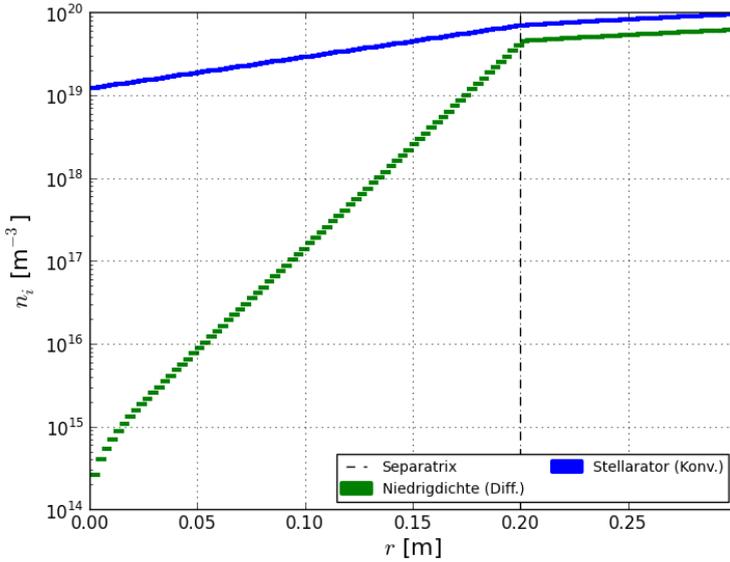


Abbildung 6.20.: Histogramme der errechneten Ionendichteprofile des NDF und des SF; für $\Delta_{SOL} = 20$ cm.

Untersuchung der finalen Umladungspositionen nach Plasmabereichen

Zum Studium der Neutralen-Abschirmung des SOL wurde räumlich in 1d, i.e. zur radialen Distanz von der ersten Wand im Hauptraum, untersucht, in welchen Plasmazonen *Rec.-CXn* letztendlich CX-Stöße vollziehen, bevor sie auf die erste Wand treffen und diese potentiell zerstäuben. Die Auswertung erfolgt mit Hilfe von Histogramm-Grafiken, welche für jede der N Zellen aus der zugrunde liegenden CELLSOR-Rechnung die Häufigkeit von finalen CX-Stößen pro Zellbreite darstellt.

Abb. 6.21 zeigt die mit CELLSOR gerechneten Histogramme der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung für finale CX-Stöße vor dem Wandaufprall, exemplarisch für die beiden ausgewählten Testfälle mit starker bzw. schwacher Neutralen-Abschirmung; bei einem Wandabstand von $\Delta_{SOL} = 20$ cm. Dabei wurden die Zählungen normiert, d.h. für jede Zelle j aus N , mit $n_j = \Delta_{cell}^{-1} \sum_i w_i$ gezählten (über den Gewichtungsfaktor w_i eines final umgeladenen Teilchens i) finalen CX-Stößen, wird die normierte lokale Wahrscheinlichkeit für einen CX-Stoß, i.e.

$$f_{CX,j} = \frac{n_j}{\sum_{j=1}^N n_j}, \quad (6.5)$$

ausgegeben, mit der Normierungsbedingung

$$\int_j dr f_{CX,j} = 1. \quad (6.6)$$

Liegt der *Peak* im wandnahen SOL und ist er im separatrixnahen Pedestal unterdrückt, so wird von starker Abschirmung (SF, Konvektion) gesprochen, bei umgekehrten Verhältnissen von schwacher Abschirmung (NDF, Diffusion) gesprochen.

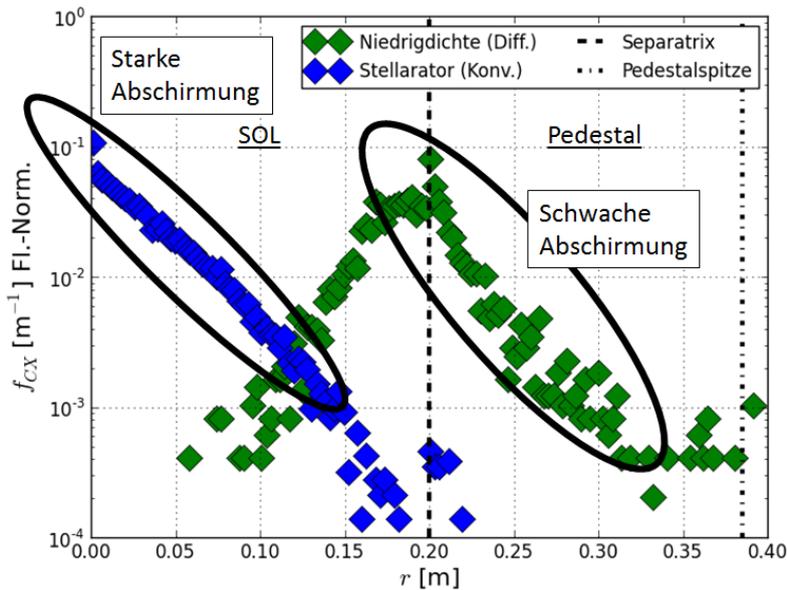


Abbildung 6.21.: Histogramme der radialen Wahrscheinlichkeitsverteilung für finale CX-Stöße vor dem Wandaufprall; CELLSOR-Rechnungen mit $\Delta_{SOL} = 20$ cm.

Faltung der Umladungspositionen mit den Zerstäubungsausbeuten beim Wandaufprall

Die MC-Rechnung erlaubt es, die in Abb. 6.21 gewonnenen Informationen über die Wahrscheinlichkeiten für CX-Stöße, aufgelöst nach Plasmabereichen, in eine Verteilung des radialen *Schadenspotenzials* zu übersetzen.

Bei der technischen Umsetzung zählt CELLSOR für jedes TT sowohl die Position der *finalen* CX-Stöße und faltet diese anschließend mit den beim Wandaufprall errechneten, energie- und winkelabhängigen ZA'en $Y_{CX,i}(E, \theta)$ eines TT i .⁷⁴

Es wird also für jede MC-Zelle j in CELLSOR eine lokale, mittlere ZA Y_{loc} gebildet, i.e.

$$Y_{loc,j} = f_{CX,j} \cdot \bar{Y}_{CX,j}, \quad (6.7)$$

mit

$$\bar{Y}_{CX,j} = \sum_i Y_{CX,i}. \quad (6.8)$$

Die relative ZA Y_{rel} eines Testfalls entspricht dann der Fläche unter der jeweiligen Kurve in Abb. 6.22, i.e. $Y_{rel} = \int dr Y_{loc}(r)$.

Abb. 6.22 zeigt nun - aufgrund des Einflusses der Iontemperatur des Hintergrundplasmas - im Gegensatz zu Abb. 6.21 eine klare vertikale Separation der Datenpunkte an der Separatrix.⁷⁵

⁷⁴Dabei fließt implizit die *Plasmatemperatur* der MC-Zelle des *finalen* CX-Stoßes in die Bewertung mit ein, da diese die Energie des freigesetzten Neutralteilchens bestimmt.

⁷⁵Dieser Sprung liegt daran, dass das Plasma von der Separatrix ($T_{sep} = 300$ eV) in den SOL mit einer Abfalllänge von $\lambda_{T1} = 1$ mm auf ≤ 10 eV abkühlt, während die Temperatur innerhalb des Pedestals mit Gradienten mit $\nabla T \ll -100$ eV/cm rapide auf mehrere keV anwächst.

Konsequenterweise ist das Schädigungspotenzial f_{CX} von umgeladenen Neutralteilchen im heißen Pedestal wesentlich höher, als im kälteren SOL.

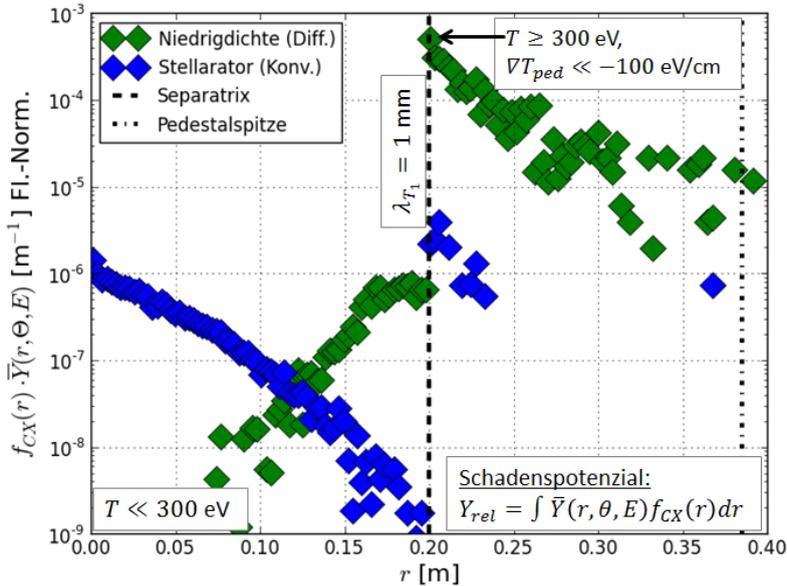


Abbildung 6.22.: Lokale Zerstäubungswahrscheinlichkeiten für final umgeladene Neutralteilchen, die auf die Wand fliegen; CELLSOR Rechnungen mit $\Delta_{SOL} = 20$ cm.

6.8. Schlussfolgerungen für DEMO1

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Fallstudien zur Berechnung der mittleren, globalen Nettoerosion im Hauptraum der Brennkammer von DEMO1 durchgeführt, welche durch PWW verursacht wird.⁷⁶ Die Auswertung der Ergebnisse erlaubt wesentliche *Schlussfolgerungen*, welche teilweise für die weitere Ausarbeitung des Desings von DEMO1, insbesondere der Parameter der Plasmandschicht, relevant sein könnten.⁷⁷

Die Studien von Behrisch *et al.* ergaben bereits für ITER, anders als bei kleineren Tokamaks mit leichtmetallischen Wänden und geringer Fusionsleistung, dass die Zerstäubung der ersten Wand vorwiegend durch Neutralteilchen - statt durch aufprallende Ionen - verursacht wird.[7] Die erste Schlussfolgerung der für DEMO1 durchgeführten Erosionsstudien lautet:

1. Die globale Nettoerosion der ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer wird bei Tokamaks der Größe und Leistung von DEMO1, unter Verwendung eines *Pelletinjektionssystems* zur *ext. Brennstoffzufuhr*, nahezu vollständig durch den Verlauf der Dichte- sowie Temperatur des Pedestals des Kernplasmas bestimmt (Tab. 6.1, Abb. 6.8).

⁷⁶ *Baseline-Parameter* (Kap. 3.5) in Anlehnung an das europäische *Baseline-Design* eines *gepulsten Demonstrationskraftwerks* (DEMO1) auf Basis von thermonuklearer KFT (mit magnetischem Plasmaeinschluss); mit $P_{Fus} = 2$ GW.

⁷⁷ Die *Frühdiesignphase* für DEMO1 endet im Jahr 2021.

Den Parametern des mittleren Wandabstands sowie der Rolle des Ionenflusses bzw. Wandrecyclings auf den Schaden durch Ionen bzw. CX-Neutrale, die nicht dem *Fuelling* zuzuordnen sind, wurde zu Beginn der Studien eine stärkere Wirkung zugeschrieben als später beobachtet. Die Erosionsstudien zeigten wiederum:

2. Der Hauptmechanismus, der zur Zerstäubung der protektiven Wolframschicht der ersten Wand führte, bestand aus der Zerstäubung durch mit Energien im Bereich tausender eV aufrallende Brennstoff-Neutralteilchen, welche aus dem *Pedestal* durch *CX-Stöße* freigesetzt wurden.

CX-Stöße ereigneten sich zwischen *kalten* Neutralteilchen und *heißen* Plasmaionen. Einige Prozent davon kehrten typischerweise mit Energien von mehreren tausend eV auf die erste Wand zurück (Energieverteilung des *Niedrigdichtefalls* (NDF), Abb. 6.11) und führten dort zur physikalischen Zerstäubung.⁷⁸

6.8.1. Schadensbeiträge zur Bruttoerosion

Erwartet wurde jedoch, dass die Beiträge zur Zerstäubung durch in der Schicht *beschleunigte Ionen* (D,T,He,N,W) sowie durch *Rec.-CXn*, insbesondere für magnetische Konfigurationen mit geringen mittleren Wandabständen (der Separatrix), die Erosion an DEMO1 dominieren würden.⁷⁹

- Beim Tokamak-DEMO1 spielten die aufrallenden Ionen sowie *Rec.-CXn* jedoch nur eine untergeordnete Rolle für die Erosion (zusammen mit max. 7 % des Gesamtschadens, bei $\Delta_{SOL} \geq 5$ cm im NDF; Abb. 6.16).
- Beim *Stellaratorfall* (SF) dagegen waren Ionen sowie *Rec.-CXn* zunächst für 69 % des Gesamtschadens verantwortlich (für $\Delta_{SOL} = 5$ cm). Ab $\Delta_{SOL} \geq 10$ cm konnte deren Beitrag auf 50 % des Gesamtschadens reduziert werden; ab $\Delta_{SOL} = 28$ cm sogar auf 20 % (Abb. 6.15).

Natürlich galt dies für ein fest vorgegebenes Temperaturprofil im SOL (Abb. 6.4), i.e. für ein konkretes beschleunigendes Schichtpotenzial $V_{sh}(T_e, T_i)$. Selbst bei Temperaturen von $T_e = T_i \gg 10$ eV und $\Delta_{SOL} = 5$ cm wären die Ionenbeiträge zum Gesamtschaden der ersten Wand - beim Tokamak - gegenüber der Schädigung durch hochenergetische *Pedestal-Neutrale* vernachlässigbar klein.

Die Ursache dafür liefert die *Kernerkenntnis* der durchgeführten Studien:

3. Bei einem Tokamak-DEMO1 mit einer Fusionsleistung von zwei Gigawatt ist der Beitrag der durch das *Fuelling* ins heiße *Pedestal* eingetragenen kalten Neutralen, für die dortige *Freisetzung* heißer Neutraler durch CX-Stöße, stets gegenüber dem *Wandrecycling* dominant (Abb. 6.16).

Alleine der *Wandabstand* (der Separatrix) erwies sich als ungeeigneter Parameter zum Schutz der ersten Wand, da weder die Flussreduktion für *aufrallende Ionen*, noch des betragsgleichen *Wandrecyclings* kalter Neutralteilchen, sensitiv auf die Wanderosionsraten war (Abb. 6.8).⁸⁰

⁷⁸Die chemische Erosion ist beim Plasmakontakt mit einer Wolframberfläche vernachlässigbar.

⁷⁹Durch die Konfiguration des mittleren Wandabstands kann sowohl der Ionenfluss auf die erste Wand als auch der Recyclingfluss von der ersten Wand reguliert werden.

⁸⁰Aufgrund der hohen Fusionsleistung von zwei Gigawatt gelangen - unabhängig vom Wandabstand - durch das *Fuelling* (Flüsse des *Fuellings*, Abb. 6.13) stets annähernd gleich viele Neutralteilchen ins heiße *Pedestal* (Ionenquelle des Kernplasmas) und führten zur Freisetzung schädigender Neutralteilchen mit Energien von bis zu mehreren tausend eV.

Beim Stellarator war dies, aufgrund der erhöhten mittleren Verbindungslänge zwischen der Separatrix an der oberen Mittelebene und den Divertor-Targets (Kap. 6.5), nicht der Fall, da der Transport senkrecht zu den magn. Feldlinien im SOL, gegenüber dem Verlustparameter $\tau_{||}$, eine stärkere Wirkung entfachte.

6.8.2. Transportmechanismus

4. Die Natur des Transportmechanismus senkrecht zu den magnetischen Feldlinien, i.e. Transport durch Diffusion bzw. Konvektion, zeigte in den Tokamak-Testfällen keinen signifikanten Einfluss auf die erzielten Erosionsraten (Abb. 6.8).

Der Hauptunterschied zwischen diffusivem und konvektivem Transport liegt - in einer stationären Betrachtung - im Verlauf des Ionendichteprofiles im SOL. Insbesondere im Falle konvektiven Transports wurde experimentell beobachtet, dass sich eine breite *Dichteschulter* bis dicht vor die Wand ausbildet.⁸¹ Dieses Verhalten zeigte sich auch in den selbstkonsistent berechneten Ionendichteprofilen (analytische Lösung der *Kontinuitätsgleichung*; Abb. 6.20).

6.8.3. Neutralen-Reabschirmung im SOL

Die Profilform der Ionendichte im SOL beeinflusste zum einen die Fähigkeit zur Reabschirmung Scr_b der Wand gegenüber zurückkehrenden, heißen *Ped.-Neutralen*.⁸² Es konnte jedoch gezeigt werden, dass die mittleren ZA'en von auf die Wand prallenden *Ped.-Neutralen* deutlich schwächer mit dem Wandabstand Δ_{SOL} abnahmen (Abb. 6.10), als die Fähigkeit zur Reabschirmung zunahm (Abb. 6.9).

Eine weitere Analyse zeigte, dass der Anteil an wiederkehrenden Neutralen mit Energien oberhalb von 1000 eV, auch bei starker Reabschirmung, nur schwach reduziert werden konnte (Abb. A.4).

5. Selbst beim Tokamak-Testfall mit *kritischer Dichte* (KDF), i.e. $n_{ped} = 1,15 n_{GW}$ und $n_{sep} = 1,5 n_{det}$, konnte der Anteil an aufprallenden *keV-Ped.-Neutralen* durch einen vergrößerten *Wandabstand*, i.e. $\Delta_{SOL} = 5 \rightarrow 42,5$ cm, nicht hinreichend reduziert werden (Abb. A.4), um als geeigneter Designparameter zum Schutze der Wand eingeordnet zu werden (Abb. 6.8).

Dies war zu beobachten, obwohl die Reopazität für zurückkehrende Pedestal-Neutrale, bei einer Vergrößerung des *Wandabstandes* von $\Delta_{SOL} = 5 \rightarrow 42,5$ cm, um $op_b = 0,35 \rightarrow 10^{-4}$ reduziert werden konnte (Abb. A.3). Ferner zeigte sich, dass die Reabschirmung gegen den geringen Anteil *schädigender*, hochenergetischer *keV-Ped.-Neutraler* (mit $E_{kin} \geq 1$ keV), selbst im Falle hoher Dichten und großer Wandabstände ungenügend war (Abb. 6.9, 6.10).

Beim SF war dies anders. Hier reichten die Dichtelevel im SOL aus, um auch die hochenergetischen Neutralen abzuschirmen (Abb. 6.12, Abb. A.4). Dabei zeigte sich eine stetige Reduktion sowohl der Reopazität (Abb. A.3), als auch der ZA durch *Pedestal-Neutrale* (Abb. 6.10).

⁸¹Der konvektive Transportfall wurde beim Plasmabetrieb an JET, COMPASS, Alcator C-MOD, D3D, JT-60 und AUG beobachtet.[87, 88, 93, 110, 22, 106, 46]

⁸²In Kap. 6.7.5 wurde der Mechanismus der Neutralen-Abschirmung im Detail beleuchtet (Abb. 6.21, Abb. 6.22). Dabei wurden die finalen (vor dem Wandaufprall) Positionen für CX-Stöße mit den erzielten ZA'en gefaltet und nach Plasmabereichen zerlegt.

6.8.4. Prompte Redeposition von erodiertem Wolfram

Eine weitere Besonderheit des SF zeigte sich in der *Selbstheilung* der Bruttoerosion durch prompte Redeposition (Kap. 3.4.3).

6. Die *Selbstheilung* durch prompte Redeposition erodierter Wolframotope (im Hauptraum) war in sämtlichen simulierten Tokamak-Testfällen stets gering, i.e. $f_{dep} \leq 0,07$ (Abb. 6.14).⁸³
Beim Stellarator dagegen war diese im konvektiven Transportfall mitunter sehr hoch, i.e. $f_{dep} = 0,89$ (bei $\Delta_{SOL} = 5$ cm).

Beim konvektiven Senkrechttransport des Stellarators führte die Ausbreitung der *Dichteschulter* im Ionendichteprofil des SOL zu kleinen Ionisationswegstrecken für erodierte Wolframotope, welche innerhalb des ersten Larmor-Orbits lagen, und damit zur starken prompten Redeposition (Abb. 6.14).

- Für $\Delta_{SOL} < 10$ cm lag der prompte Redepositionsanteil bei $f_{dep} \gg 0,8$.
- Ab $\Delta_{SOL} \geq 28$ cm konnte dieser auf $f_{dep} \leq 0,1$ reduziert werden.
 - Im diffusiven Transportfall genügten dazu $\Delta_{SOL} \geq 10$ cm.

6.8.5. Erosionsursachen

Beim Tokamak wurde die Nettoerosion nahezu vollständig durch die *Energieverteilung* der schädigenden *Ped.-Neutralen* bestimmt; diese wurde wiederum über die Pedestaltemperatur und -dichte bestimmt.

- Die Dichte regulierte die Eindringtiefen innerhalb des Pedestals; die Temperaturgradienten an DEMO1 waren für die verschiedenen Testfälle stets enorm, i.e. $\nabla T_{ped} \ll -100 \text{ eV cm}^{-1}$.
- Die Temperatur und vorrangig ihr Gradient bestimmten gemeinsam mit den Eindringtiefen die Energieverteilung der durch CX-Stöße *freigesetzten Ped.-Neutralen!*

7. Die Nettoerosionsrate einer Wolframwand verhält sich im Tokamak proportional zur Pedestaltemperatur und antiproportional zur Pedestaldichte (Tab. 6.1, Abb. 6.8).

Eine Konfiguration der Randschichtparameter sollte dazu führen, dass der aus den berechneten Nettoerosionsraten resultierende Abtrag der obersten 10 % der protektiven Wolframbeschichtung der ersten Wand (im Hauptraum der Brennkammer), eine *Wandlebensdauer* ermöglicht, welche größer ist, als die Zeitspanne der vorgesehenen Austauschintervalle des Starter- bzw. Nachfolgeblankets.⁸⁴

⁸³Dies fiel bei der Betrachtung der Nettoerosionsraten (Abb. 6.8) nicht ins Gewicht.

⁸⁴In der EFDA-Roadmap wurde von Romanelli *et al.* festgeschrieben, dass der Austausch des Starter- bzw. Nachfolgeblankets nach einer kumulierten Neutronenschädigung von 20 bzw. 50 dpa erfolgen sollte.[127] Dies entspricht 2 bzw. 5 fpy, bei einer Fusionsleistung von 2 GW (Kap. 3.4.4).

6.8.6. Testfälle verschiedener Randschichtparameter

8. Die mittlere globale Nettoerosionsrate variierte beim

- NDF von $100 \rightarrow 68 \mu\text{m fpy}^{-1}$, für $\Delta_{\text{SOL}} = 5 \rightarrow 42,5 \text{ cm}$,
- HDF von $58 \rightarrow 38 \mu\text{m fpy}^{-1}$, für $\Delta_{\text{SOL}} = 5 \rightarrow 35 \text{ cm}$,
- KDF von $29 \rightarrow 22 \mu\text{m fpy}^{-1}$, für $\Delta_{\text{SOL}} = 12,5 \rightarrow 42,5 \text{ cm}$,
- SF von $32 \rightarrow 3 \mu\text{m fpy}^{-1}$, für $\Delta_{\text{SOL}} = 5 \rightarrow 42,5 \text{ cm}$.

Die maximal tolerierbare Erosionsrate betrug für das Starter-Blanket $100 \mu\text{m fpy}^{-1}$ und für das Nachfolgeblanket $40 \mu\text{m fpy}^{-1}$. Der NDF würde zum Betrieb des Nachfolgeblankets nicht ausreichen.

Beim HDF wäre dies - unter Berücksichtigung der stat. Fehler der CELLSOR-Rechnungen - ab einem Wandabstand von $\Delta_{\text{SOL}} \geq 20 \text{ cm}$ möglich.

Der KDF sowie SF wären - für sämtliche Δ_{SOL} - für den Betrieb des Starter- sowie Nachfolgeblankets ausreichend.

6.8.7. Reduktion der Einschlussgüte im Niedrigdichtefall

Die gezielte Reduktion der Einschlussgüte im Kernplasma bietet eine Möglichkeit zur Optimierung der Erosionsrate im NDF. Dies könnte sowohl über das Plasma-*Shaping* (Abweichungen vom poloidalem Kreisquerschnitt), als auch über den getriebenen Plasmastrom erfolgen.

9. Durch Variationen des Plasma-*Shapings*, i.e. der Elongation um $\kappa = 1,59 \rightarrow 1,3$ sowie der Triangularität um $\delta = 0,33 \rightarrow 0,21$, kann der Pedestaldruck zu $p_{\text{ped}} = 54,5 \rightarrow 37 \text{ kPa}$ reduziert werden.⁸⁵

Damit ließe sich auch der NDF mit einer Pedestaltemperatur analog zum KDF betreiben, i.e. $T_{\text{ped}} = 4,6 \rightarrow 3,1 \text{ keV}$ (Abb. 6.18).

Mit reduzierter Pedestaltemperatur zeigte der NDF die erwartete Reduktion der mittleren globalen Nettoerosionsrate.

10. Mit einer Pedestaltemperatur von 3100 eV nahm die Nettoerosionsrate beim NDF Werte zwischen $52 \rightarrow 36 \mu\text{m fpy}^{-1}$ an, für $\Delta_{\text{SOL}} = 5 \rightarrow 42,5 \text{ cm}$.

Das schwächere *Confinement* würde den Betrieb des Nachfolgeblankets an DEMO1 im NDF, ab $\Delta_{\text{SOL}} \geq 20 \text{ cm}$, bis zum vorgesehenen Austausch ermöglichen.

6.8.8. System der externen Brennstoffzufuhr

Eine letzte ergänzende - wenn auch zu erwartende - Schlussfolgerung lautet:

11. Ein reines *Gaszufuhr-System* ist an DEMO1 zur *ext. Brennstoffzufuhr* ungeeignet; ein *Pelletinjektionssystem* dagegen schon.⁸⁶

Vergleichsrechnungen zwischen Systemen der Gaszufuhr und der Injektion gefrorener Pellets ergaben im NDF (Pedestaldichte bei 85% der *Greenwald-Dichte*), bei einer *Heliumkonzentration* im Kernplasma von 1% und einem Wandabstand von zwanzig Zentimetern (Kap. 6.4):

⁸⁵Gemäß dem in der *ITER-Physics-Basis* publizierten Multi-Maschinen-Skalierungsgesetz für den *Pedestaldruck*; Kap. 3.2.8.[33]

⁸⁶Sämtliche Schlussfolgerungen beziehen sich daher auf Rechnungen mit *ext. Brennstoffzufuhr* durch Pelletinjektion.

- Gaszufuhr (bei 800 Kelvin): 33,6 % des in die Brennkammer eingeblasenen Brenngases gelangten ins Kernplasma und wurden dort ionisiert.
- Pelletinjektion (mit 1000 m/s und 20 Hz): 95,5 % des in die Brennkammer injizierten Pelletbrennstoffs wurden im Kernplasma ablatiert und ionisiert.
 - Bei der Gaszufuhr wurde ein *Beipass* an Tritiumatomen mit der Rate $1,34 \cdot 10^{23} \text{ s}^{-1}$ abgepumpt, ohne dass diese zuvor das Kernplasma erreichten.
 - Bei der Pelletinjektion war diese um das 41,8-fache niedriger.
 - * Allein der radioaktive Zerfall des auf diese Weise abgepumpten Tritiums, welcher während der Verweilzeit in der Tritiumanlage stattfände, würde die benötigte Tritium-Brutrate (TBR)
 - im Falle der Gaszufuhr um $\Delta_{TBR} \leq 1,6 \%$,
 - und bei der Pelletinjektion um $\Delta_{TBR} \leq 0,038 \%$ (vernachlässigbar) erhöhen.
 - * Das Gaszufuhrsystem würde daher die Möglichkeiten der Installation von Plasmediagnostiken verringern, da weniger Oberflächenanteil in der Brennkammer für *Port-Plugs* zur Verfügung stünde.

Kapitel 7.

Zusammenfassung

Mit dem Code to Estimate the Lifetime Limited by Sputtering Of a Reactor wall (CELLSOR) wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Code zur Berechnung der Neutralteilchenkinetik sowie der Zerstäubung der ersten Wand im Hauptraum der Brennkammer eines Fusionsreaktors entwickelt.

Eine entscheidende Anforderung bei der Entwicklung vom CELLSOR bestand darin, einen für die Integration in die SM! (SM!) passenden Detailgrad der Modellierung zu finden, der die spezifischen Erfordernisse der Modellierung von DEMO1 erfüllt.

CELLSOR ermöglicht die stationäre Berechnung der Zerstäubung, welche durch das Aufprallen von Brennstoff-Neutralen (Deuterium (D)- und Tritium (T)-Atome) im Anschluss an deren Freisetzung durch Ladungsaustausch (CX)-Stöße in heißen Plasmabereichen hervorgerufen wird. Dies ist die Hauptursache für die Zerstäubung von Wandmaterial.

Plasmaentladungen im Tokamak mit gutem Energieeinschluss erzeugen typischerweise ein heißes *Randschichtpedestal*, welches sich durch starke Temperatur- und Dichtegradienten auszeichnet. Temperaturen im keV-Bereich führen nach CX-Stößen auch zur Freisetzung hochenergetischer Neutralteilchen. Die *externe Brennstoffzufuhr* durch Gasinjektion oder Pellets verstärkt diesen Effekt, während der gute Teilcheneinschluss den Ionentransport über die Separatrix sowie auf die erste Wand reduziert. Das Resultat dieser Prozesse sind relativ niedrige Flüsse von in der *Debye-Schicht* auf die erste Wand beschleunigten Ionen sowie relativ hohe Flüsse hochenergetischer CX-Neutralteilchen, den *keV-Ped.-Neutralen*.

Der Code CELLSOR wurde vollständig in der Programmiersprache *Python2.7* geschrieben, unter Verwendung von *Cython* (Kompilierung in *C*), *Numerical Python*, *Scientific Python* und weiteren Bibliotheken aus *Python(x,y)*.

CELLSOR löst 1d kinetische Gleichungen im 7d Phasenraum (Ort \vec{p} , Impuls \vec{v} , Teilchenzustand i), i.e. im 3d kartesischen Torus mit einer 1d Plasmabeschreibung sowie Modellierung der physikalischen Wechselwirkungen. Die berechneten *Atom-Plasma-Wechselwirkungen* umfassen Ionisationsstöße mit Elektronen sowie CX-Stöße mit Ionen. Bei den *Molekül-Plasma-Wechselwirkungen* werden insgesamt sechs Dissoziations- sowie Ionisationskanäle modelliert.

Zur Berechnung der energie- und winkelabhängigen Zerstäubungsausbeuten (ZA'en) für Wolfram (W), bei dessen Beschuss mit D- und T-Atomen, wurde die Eigenschaft der Isotropie der Flugrichtungen von nach CX-Stößen freigesetzten Neutralen ausgenutzt. EIRENE, das Standardwerkzeug der Modellierung des Divertors des in Cardarache im Bau befindlichen ITER, erlaubt dies zwar auch, die Kombination aus beschleunigter, vereinfachter Rechnung in 1-d, bei gleichzeitiger Simulation poloidaler und toroidaler Krümmungseffekte, ist jedoch eine besondere Eigenschaft des CELLSOR-Codes.

Mit dem CELLSOR- sowie EIRENE-Code wurden zum Vergleich *Benchmarkrechnungen* eines ITER- sowie eines DEMO-Testfalls durchgeführt. Der Vergleich mit EIRENE führte im Rahmen der statistischen Fehler der Rechnungen zu übereinstimmenden Energien der Neutralen beim Wandaufprall, sowie zur Übereinstimmung der liniengemittelten *Neutralgasdichten* im Scrape-Off-Layer (SOL). Dabei wurden zunächst den freigesetzten Neutralteilchen monoenergetische Energien zugewiesen.

Das Gros der Ionen in den heißen Plasmazonen folgt allerdings einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung (MBV). Die Wahrscheinlichkeit eines CX-Stoßes hängt für ein atomares Teilchen von dessen Relativgeschwindigkeit zu den Ionen ab.

Ergo ergibt sich für die Geschwindigkeiten der freigesetzten *CX-Neutralen* eine spezielle Verteilung, welche nach einem Algorithmus von Cupini *et al.* in CELLSOR übernommen wurde. Unter Verwendung dieser Verteilung wurde - im Vergleich zur monoenergetischen Energiezuweisung nach CX-Stößen - ein deutlicher Anstieg der mittleren Energien beim Wandaufprall um nahezu fünfzig Prozent (DEMO-Testfall) beobachtet. Dies demonstriert die Bedeutung der Verwendung einer *korrekten Geschwindigkeitsverteilung*.

Eine Erweiterung von CELLSOR zur Modellierung DEMO-relevanter Verhältnisse stellt die Entwicklung eines *Ablationsmodells* für gefrorene Brennstoffpellets dar. Bei EIRENE besteht die Teilchenquelle entweder aus dem *Wandrecycling* oder der *Gaszufuhr durch ein Ventil*. Das zur Modellierung der Injektion gefrorener Pellets entwickelte *Ablationsmodell* von CELLSOR basiert auf einem von Garzotti *et al.* aufgestellten Skalierungsgesetz für die *Pelletablation in Maxwell'schen Plasmen*.

Zur Berechnung der Zerstäubung von Wandmaterial durch Ionen wurde ein vereinfachtes 0-d *Schicht-Approximationsmodell* entwickelt und in CELLSOR integriert. Ionen werden in der Brennkammer im wandnahen Plasma in einer elektrischen Raumladungszone, der *Debye-Schicht*, zur Wand beschleunigt. Im Modell werden die an DEMO1 auftretenden Ionenspezies behandelt: D und T (Brennstoff), Helium (He) (*Fusionsasche*), Stickstoff (N) / Krypton (Kr) / Xenon (Xe) (*Seeding Gas*) sowie W (erodiertes Wandmaterial).

Zur Berechnung der *prompten Redeposition* von erodiertem Wandmaterial sowie der *Selbstzerstäubung* durch auf die erste Wand zurückkehrende Wolframteilchen, wurde die Erweiterung CELLSOR ERO entwickelt. Die Erosion wird mit CELLSOR berechnet. Für die Startenergien der erodierten Wolframatome wird eine zum Auslöseprojektil passende *Thompson-Verteilung* verwendet.

Zur Bestimmung der Erosionsraten und zur Skalierung der ZA'en einer Wolframwand durch aufprallende Ionen und Atome, wurde die Teilchenbilanz im SOL, i.e. der Randregion offener magnetischer Feldlinien, gelöst. Dazu wurde im Rahmen eines Fluidmodells in 1,5-d ein Algorithmus zur analytischen Lösung der *Kontinuitätsgleichung* entwickelt. Das Ionendichteprofil im SOL sowie die auf die Wand strömende Flussdichte wurden auf diese Weise selbstkonsistent berechnet. Dazu wurde ein iteratives Kopplungsverfahren zwischen den Lösungen im Fluid- (Kontinuitätsgleichung) und Kinetik-Modell (Monte-Carlo) entwickelt.

Zusätzlich dazu wurde ein weiteres Modell zur Gewährleistung der Teilchenzahlerhaltung zwischen Kernplasma und dem SOL entwickelt. Aus dieser Rechnung wurde der benötigte wandseitige Zufluss der *ext. Brennstoffzufuhr* (Fuelling) abgeleitet. Eine solche Skalierung des Fuelling-Zuflusses wird genau dann benötigt, wenn die Zerstäubung vorwiegend, wie für DEMO1 erwartet, durch keV-Ped.-Neutrale hervorgerufen wird, deren Freisetzung durch CX-Stöße mit Fuelling-Atomen (*Pel.-CXn*) und nicht jenen des *Wandrecyclings* (*Rec.-CXn*) geschieht. In den meisten Modellen werden typischerweise nur die *Rec.-CXn* behandelt. Das *Ablationsmodell* von CELLSOR stellt somit eine wesentliche Verbesserung der Modellierung der Erosionsquellen an DEMO1 dar.

Ein wesentliches Ziel der Arbeit bestand darin, für DEMO1 passende Werte der *Plasmarandschichtparameter* ausfindig zu machen sowie ein Kriterium für *akzeptable* Nettoerosionsraten aufzustellen. Als Kriterium für eine tolerierbare Erosionsrate wurde gefordert, dass $\leq 10\%$ der protektiven Wolframschicht, bis zu den in der *EFDA-Roadmap zur Realisierung von Fusionsstrom* (EFDA-Roadmap) vorgesehenen Austauschzeitpunkten, abgetragen werden. Dies entspricht einer Nettoerosionsrate von weniger als 100 (Starterblanket) bzw. $40\ \mu\text{m}$ (Nachfolgeblanket) der W-Schicht pro Vollbetriebsjahr (fpy).

Zur Untersuchung der Auswirkungen der *Randschichtparameter* auf die Erosionsrate wurden systematische Fallstudien aufgesetzt.

Die Parameter deckten den Wertebereich von Pedestaldichten ab, die bei 85 % (*Niedrigdichtefall*: NDF), 100 % (*Hochdichtefall*: HDF) und 115 % (*krit.-Dichtefall*: KDF) des empirischen *Greenwald-Limits* lagen. Zusätzlich zu den Tokamakfällen wurde zudem ein *Stellaratorfall* (SF) definiert, mit einer Pedestaldichte von 130 % der (fiktiven) *Greenwald-Dichte*. Ein *Greenwald-Limit* existiert am Stellarator nicht. Die relative Schrittweite der Pedestaldichten wurde hier für eine bessere Vergleichbarkeit zu den Tokamakfällen äquidistant, i.e. +15 %, gewählt.

Zur Berücksichtigung der stärkeren Bedeutung des Wandrecyclings am Stellarator sowie des in seiner Wirkung stärkeren Transports senkrecht zu den magn. Feldlinien im SOL, wurde die *mittlere Verbindungslänge* entlang der magn. Feldlinien zum Divertor, gegenüber einem Tokamak analoger Größe und Plasmaform, verzehnfacht. Dies entspricht der effektiven Verbindungslänge zu den Targets der Inseldivertoren.

Die verschiedenen Dichtewerte in der Randschicht führten bei den Tokamakfällen, im Rahmen des verwendeten Skalierungsgesetzes, zu unterschiedlichen Pedestaltemperaturen sowie -drücken. Diese variierten zwischen 4,6 keV (NDF) und 3 keV (KDF). Zur Gewährleistung identischer Teilchenflüsse in den SOL wurden die Separatrixdichten und Transportparameter konsistent berechnet. Dadurch waren für jeden Testfall die Brennstoff-Quellraten im Kernplasma sowie die Fuelling-Zuflüsse möglichst identisch; ein wichtiger Aspekt für die Vergleichbarkeit der berechneten Erosionsraten.

Am Beispiel des NDF wurde gezeigt, dass eine Brennstoffzufuhr durch *Gaseinlassventile* für DEMO1 ungeeignet wäre, da im Vergleich zur *Pelletinjektion* ein erhöhter Anteil des Brennstoffs im SOL ionisiert und abgepumpt würde. Zusätzliche radioaktive Zerfallsverluste in der Tritiumanlage können durch die Pelletinjektion ebenso vermieden werden, wie Auswirkungen auf die benötigte Tritium-Brutrate des Reaktors, welche bei der Gaszufuhr um 1,6 % erhöht würde. Dies wäre bereits kritisch, da der verknappende Wandanteil, der für Diagnostiken und Aktuatoren zur Verfügung stünde, zusätzlich eingeschränkt würde. Sämtliche Erosionsstudien wurden daher mit dem für DEMO1 relevanten *Pelletinjektionsmodell* gerechnet.

Für die *Tokamakfälle* konnte gezeigt werden, dass die *Nettoerosionsrate* deutlich stärker durch die Auswahl der Pedestalparameter, als durch die Wahl des mittleren Wandabstands (der Separatrix) oder des Transportmechanismus beeinflusst wurde. Die schützende Abschirmung der Randschicht gegen Ped.-Neutrale wurde stets durch eine Überlagerung aus zwei Effekten bestimmt: zum Einen aus den unterschiedlichen Energieverteilungen der Ped.-Neutralen (Temperatureffekt), sowie zum Anderen aus den unterschiedlichen freien Wegstrecken für Ionisations- sowie CX-Stöße (Dichteeffekt). Um die Wand gegen keV-Ped.-Neutrale, i.e. solche mit Energien von mehr als 1000 eV, abzuschirmen, würden über den SOL gemittelte Elektronendichten von $\geq 10^{19} \text{ m}^{-3}$ benötigt.

Eine solche *effiziente Reabschirmung* konnte nur beim SF erreicht werden, da beim Stellarator höhere SOL-Dichten vorliegen als beim Tokamak. Ab Wandabständen von $\geq 10 \text{ cm}$ wurden die Flüsse des Wandrecyclings sowie der aufprallenden Ionen auch beim Stellarator so weit abgeschwächt, dass mindestens die Hälfte der Bruttoerosion den *Pel.-CXn* zuzuschreiben war. Die Beiträge der *Pel.-CXn* waren beim Tokamak für sämtliche Konfigurationen dominant.

Während der Transportmechanismus bei den Tokamakfällen für die Nettoerosion irrelevant war, zeigte der SF große Unterschiede zwischen diffusivem und konvektivem Senkrechttransport im SOL: bei diffusivem Transport führte eine *Vergrößerung des Wandabstandes* zur stetigen Reduktion der Nettoerosion, während diese beim konvektivem Transport von einem Minimalwert ausgehend zunehmend anstieg. Als Ursache für dieses Verhalten konnte die Selbstheilung der geschädigten ersten Wand durch prompte Redeposition ausgemacht werden. Der Anteil an nach der Erosion prompt redeponierenden Wolframatomten lag im konvektiven SF bei geringen Wandabständen bei etwa 90 % und fiel bereits bei mittleren Wandabständen auf $< 10 \%$ ab.

Bei diffusivem Transport sowie in den Tokamakfällen lag dagegen selbst bei einem Wandabstand von 5 cm keine *signifikante Selbstheilung* der Wand vor.

Für DEMO1 konnte gezeigt werden, dass zur Minimierung der Erosionsraten der KDF zu favorisieren wäre. Bei einem Wandabstand von 20 cm würden netto jährlich $\approx 25 \mu\text{m}$ der protektiven Wolframschicht abgetragen, i.e. 93,7 % der Schutzschicht würden bis zum vorgesehenen Austauschintervall des Starter- sowie Nachfolgeblankets erhalten bleiben. Der HDF könnte ab Wandabständen von zwanzig Zentimetern - im Rahmen der statistischen Fehler der CELLSOR-Rechnungen - ausreichen, um das Nachfolgeblanket mit ausreichender Lebensdauer zu betreiben. Für einen sicheren und *disruptionsfreien* Plasmabetrieb wäre jedoch der NDF zu bevorzugen, da nur dieser eine Pedestaldichte unterhalb des *Greenwald-Limits* aufweist. Die berechnete Nettoerosionsrate lag hier bei mindestens $80 \pm 12 \mu\text{m W pro fpy}$, i.e. im für das Nachfolgeblanket unzulässigen Bereich. Der SF zeigte hingegen die geringsten Erosionsraten mit teilweise deutlich weniger als $10 \mu\text{m W pro fpy}$.

Eine Reduktion auf *akzeptable* Nettoerosionsraten konnte jedoch auch für den NDF erreicht werden. Es wurde gezeigt, dass dazu, gegenüber dem aktuellen DEMO1-*Baseline Scenario*, ein Betrieb bei verringerter Einschlussgüte des Kernplasmas erforderlich wäre: ein verringerter Pedestaldruck hat eine günstigere Energieverteilung der *Pedestal-Neutralen* zur Folge. Praktisch könnte dies sowohl über eine Reduktion des getriebenen Plasmastroms, als auch über das *Shaping*, i.e. eine magnetische Konfiguration, welche zu einer vertikal schwächer elongierten Plasmaform führt, erreicht werden. Konsequenterweise wurde für DEMO1 ein optimierter Satz an *Shaping*-Parametern gefolgert. Unter Verwendung der *Pedestaldruckskalierung* aus der ITER-Physics-Basis wurde gezeigt, dass eine Reduktion des Pedestaldrucks von 54 kPa auf 37 kPa genügte, um auch im NDF *akzeptable* Nettoerosionsraten, i.e. unterhalb von $40 \mu\text{m W pro fpy}$, zu erreichen.

Mit dem CELLSOR-Code und den Erweiterungen wurde erfolgreich ein Modell zur effizienten Berechnung der stationären, globalen Nettoerosion eines Tokamaks entwickelt. Dabei gelang es wichtige, für die Modellierung von DEMO1 erforderliche Erweiterungen zu implementieren. Dieses Modell sollte für die Vorhersage der Untersuchungen der Nettoerosionsraten an DEMO1 ein entscheidendes Werkzeug sein. Insbesondere für PROCESS, den europäischen Systemcode zur Auslegung von DEMO1, wurde bereits angedacht eine Schnittstelle zur Verwendung von CELLSOR zu schaffen.

Anhang A.

Ergänzungen zu den PWW-Studien

An dieser Stelle werden Ergänzungen zu den PWW-Studien (Kap. 6) diskutiert.

A.1. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Brennstoffionisation

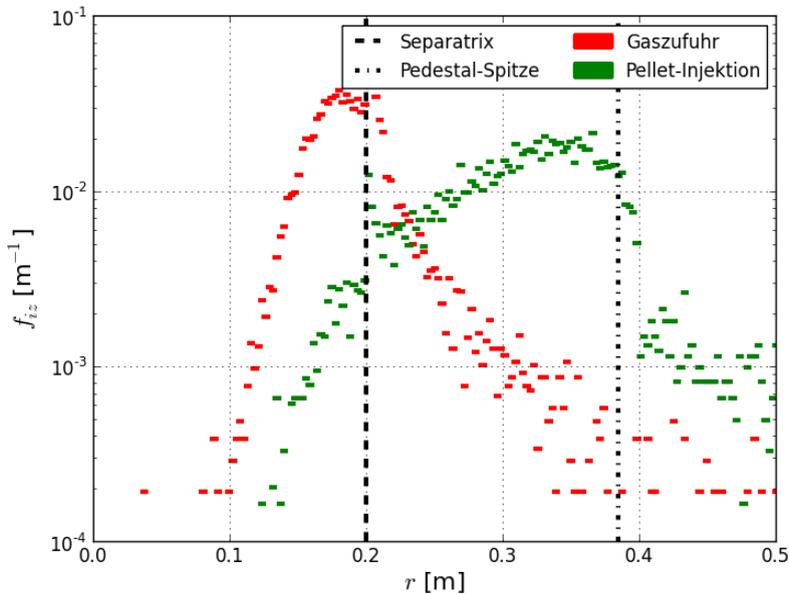


Abbildung A.1.: Histogramme der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f_{iz} pro Breite Δ_{cell} der Monte-Carlo Zellen; im diffusiven Niedrigdichtefall (Tab. 6.1) für Brennstoffzufuhr durch Gaseinlass bzw. Injektion gefrorener Pellets (Kap. 6.4) bei einem Wandabstand von $\Delta_{SOL} = 20$ cm.

Abb. A.1 zeigt die radiale Verteilung der Ionisation von wandseitig durch Gaseinlass bzw. eine Pellet-Kanone injiziertem Brennstoff (D,T). Diese wurden im *Niedrigdichtefall* (NDF) mit diffusivem Transport senkrecht zu den magnetischen Feldlinien im SOL, für einen *Wandabstand* (der Separatrix) von $\Delta_{SOL} = 20$ cm, gerechnet.

Im Falle der Gaszufuhr lag der *Peak* der Ionisation innerhalb des SOL. Die meisten Ionen wurden hier also bereits zum Divertor abgeführt und abgepumpt ohne dem Kernplasma als Ionenquelle zur Verfügung zu stehen. Im Falle der *Pelletablation* lag der *Peak* der Ionisation am oberen Rand des Pedestals.

A.2. Ionendichteprofil im SOL bei konvektivem Senkrechttransport

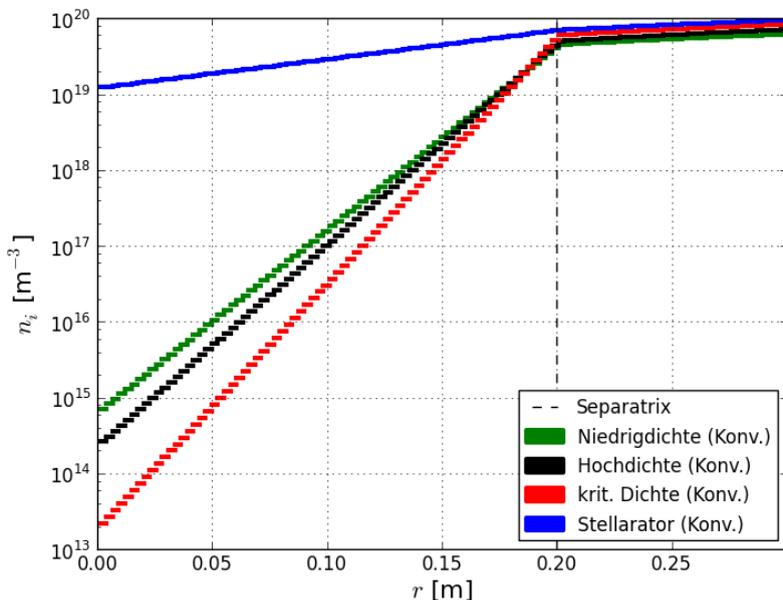


Abbildung A.2.: Ionendichteprofil der Testfälle aus Tab. 6.1; berechnet durch analytische Lösung der Kontinuitätsgleichung mit konvektivem Transport im SOL ($D_{\perp} = 10^{-5} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$, $v_{\perp} > 0$) senkrecht zu den magnetischen Feldlinien.

Abb. A.2 zeigt die resultierenden Ionendichteprofile, welche im SOL selbstkonsistent durch analytische Lösung der *Kontinuitätsgleichung* mit konvektivem Transport ($D_{\perp} = 10^{-5} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$, $v_{\perp} > 0$) berechnet wurden.¹

¹Die Kontinuitätsgleichung lässt sich nur für $D_{\perp} > 0$ lösen. Ab $D_{\perp} \leq 10^{-5} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ wurde das resultierende Ionendichteprofil vollständig durch den Parameter $v_{\perp} > 0$ festgelegt.

A.3. Reopazität des SOL für Pedestal-Neutrale

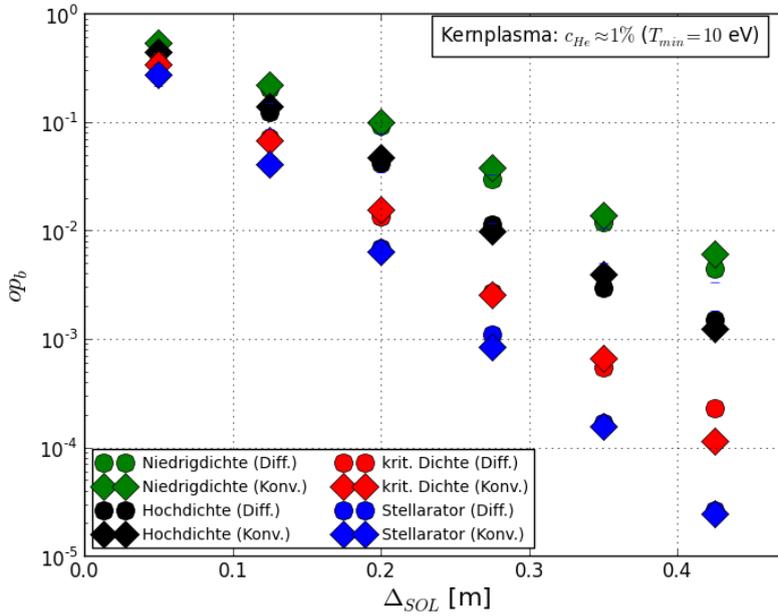


Abbildung A.3.: Reopazität op_b des SOL für Brennstoffneutrale, welche aus dem Pedestal in Richtung der ersten Wand propagieren.

Abb. A.3 zeigt die Reopazität op_b des SOL für Brennstoffneutrale, welche aus dem Pedestal in Richtung der ersten Wand propagieren. Diese nimmt umso drastischer mit Δ_{SOL} ab, je niedriger der Pedestaldruck, i.e. je höher die Pedestal- und Separatrixdichte ist, bei reduzierter Pedestaltemperatur.

A.4. Anteil an keV-Pedestal-Neutralen

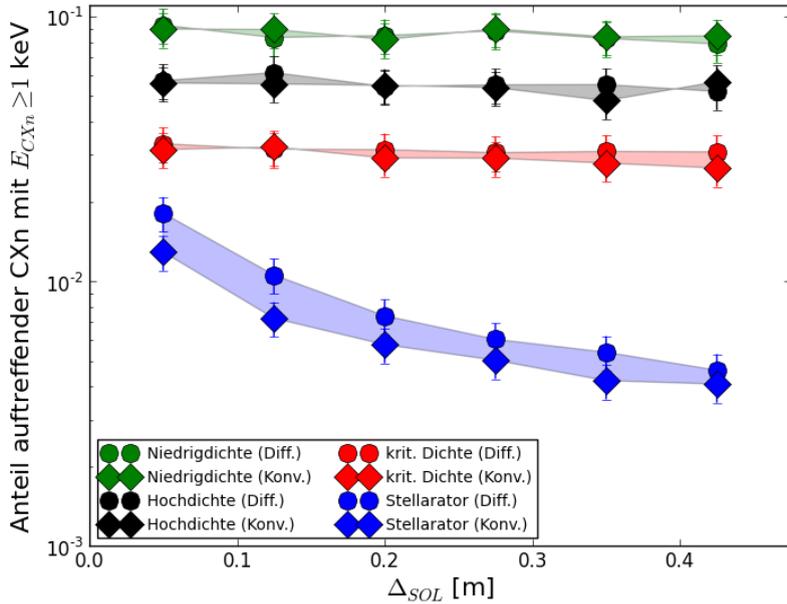


Abbildung A.4.: Anteil f_{keV} an keV-Pedestal-Neutralen.

Abb. A.4 zeigt den Anteil f_{keV} an nach CX-Stößen auf die erste Wand prallenden Neutralteilchen mit Energien $E \geq 1$ keV. Analog zur globalen Erosionsrate zeigt sich im Stellaratorfall eine deutliche Reduktion von f_{keV} für $\Delta_{SOL} = 5 \rightarrow 42,5$ cm, welche mit zunehmendem Δ_{SOL} abgeschwächt wird.

A.5. Schätzung der Transportkoeffizienten an der Separatrix

In Kap. 4.5 wird die *Kontinuitätsgleichung* (Gl. 4.71) innerhalb des SOL aufgestellt und analytisch unter Verwendung einer *Dirichlet*-Randbedingung an der Separatrix ($n(0) = n_{sep}$), sowie einer *Neumann*-Randbedingung an der ersten Wand ($\nabla n_{wall} = -\frac{n_{wall}}{\delta}$) gelöst.

Aufgrund der jeweiligen Randbedingung am linken sowie rechten Rand des SOL, wird die Teilchenbilanz einerseits konsistent zu den vorgegebenen Transportparametern (radiale Diffusion: D_{\perp} , radiale Konvektion: v_{\perp} , Verlustzeit entlang der magn. Feldlinien: τ_{\parallel}) und Randbedingungen gelöst, allerdings ohne den Teilchenzufluss aus dem Kernplasma über die Separatrix zu beschränken.² Dies führt dazu, dass typischerweise erst nach der Konvergenz zwischen MC-Rechnung (Ionisationsquelle im SOL) und der zugehörigen Lösung der *Kontinuitätsgleichung* die Rate folgt, mit der Brennstoffionen pro Sekunde über die Ränder (erste Wand, X-Punkt / Divertor) des SOL strömen.

Da die Teilchenbilanz Kernplasma-SOL fordert, dass ebenso viele Teilchen aus dem SOL herauswie in den SOL hinein strömen müssen, legt dies den Ionenabfluss des Kernplasmas fest.

²Dazu müssten Dirichlet- und Neumann-Randbedingung an der Separatrix formuliert werden.

Setzt man diesen mit der dortigen *Heliumentstehungsrate*, welche über die Fusionsleistung P_{Fus} vorgegeben wird, ins Verhältnis, so folgt eine grobe Abschätzung über die mittlere *Heliumkonzentration* im Kernplasma.³

Um also vorab die *Transportkoeffizienten* D_{\perp} , v_{\perp} und τ_{\parallel} mit angepassten Wertebereichen zu finden, wurde ein Formalismus abgeleitet, der im quellfreien Fall die *Kontinuitätsgleichung* unter Verwendung einer *Dirichlet*- sowie *Neumann*-Randbedingung an der Separatrix löst.

Die *Dirichlet*-Randbedingung lautet

$$n(x=0) = n_{sep} \quad (\text{A.1})$$

und die *Neumann*-Randbedingung lautet

$$-D_{\perp} \nabla n_{sep} + n_{sep} v_{perp} = c_{He}^{-1} \cdot \Gamma_{He}, \quad (\text{A.2})$$

mit Γ_{He} : Verhältnis aus *Heliumentstehungsrate*, i.e. $\Phi_{He} = P_{Fus} \Delta E_{DT}^{-1}$, und Separatrixoberfläche (A_{sep}), sowie c_{He} : *Heliumkonzentration*.

Im quellfreien Fall reicht es aus, die Lösung der homogenen *Differentialgleichung* 2. Ordnung (Kontinuitätsgl.) zu finden. Diese lautet:

$$n = n_{sep} \exp(\lambda x), \quad (\text{A.3})$$

mit

$$\lambda = p - \sqrt{p^2 + q} \quad (\text{A.4})$$

sowie

$$p = \frac{v_{\perp}}{2D_{\perp}}, \quad q = \frac{1}{D_{\perp} \tau_{\parallel}}. \quad (\text{A.5})$$

Die erste Ortsableitung von Gl. A.3 ergibt

$$\nabla n = \lambda n. \quad (\text{A.6})$$

Durch Gleichsetzen von Gl. A.6 mit der *Neumann*-Randbedingung folgt:

$$\frac{v_{\perp}}{2} + \sqrt{\frac{v_{\perp}^2}{4} + \frac{D_{\perp}}{\tau_{\parallel}}} = c_{He}^{-1} \frac{\Gamma_{He}}{n_{sep}}. \quad (\text{A.7})$$

Im rein diffusiven Fall ($v_{\perp} = 0$) ergibt dies

$$D_{\perp} = \left(c_{He}^{-1} \frac{\Gamma_{He}}{n_{sep}} \right)^2 \tau_{\parallel} \quad (\text{A.8})$$

sowie im konvektiven Fall, für $0,25 \cdot v_{\perp}^2 \gg D_{\perp} \tau_{\parallel}^{-1}$:

$$v_{\perp} = c_{He}^{-1} \frac{\Gamma_{He}}{n_{sep}}. \quad (\text{A.9})$$

³Zahlreiche Rechnungen mit typischen, in der Kernfusionsforschung an kleinen Tokamaks gemessenen Diffusionskonstanten, i.e. $D_{\perp} = 0.1 - 0.5 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, führten zwar zu konsistenten Lösungen innerhalb des SOL, allerdings in der Folge zu sehr hohen Teilchendurchflüssen in der Brennkammer. Dies ist insbesondere durch den Brennstoffkreislauf und der resultierenden Menge an durch die *Tritiumanlage* strömenden radioaktiven Tritiums problematisch.

Anhang B.

Ergänzungen zu den Codes CELLSOR und CELLSOR ERO

In diesem Abschnitt des Anhangs werden ergänzende Beschreibungen zum CELLSOR-Code (Kap. 4) diskutiert.

B.1. Numerischer Fehler der Rückrotationsmethode

CELLSOR-Rechnungen werden durch die *Rückrotationsmethode* ca. um das dreifache beschleunigt, verglichen mit Rechnungen, bei denen die Positions- und Geschwindigkeitsvektoren an ihren exakten Positionen im 3d-Torus gespeichert werden. Der für die Beschleunigung gezahlte Preis lässt sich anhand der numerischen Fehler bemessen, welche beim Anwenden der *Rotationsmatrizen* entstehen. Solche Fehler sind mit $\delta_{num} \approx 10^{-16}$ m sehr klein. In den meisten Fällen pflanzen sich derartige Fehler fort, da die *Rückrotationen* nach jedem Zelldurchgang angewandt werden. Da *Testteilchen* durch die Projektionen entlang einer Zellwand (Torusoberfläche) auf die positive x -Achse rückrotiert werden, lassen sich diese winzigen numerischen Abweichungen leicht korrigieren, da die exakten Zell(wand)positionen bekannt sind. Da die x - und z -Komponenten von p_{new} Null sind, muss $p_{new,x} - \rho_i = 0$ gelten:

$$\vec{p} = \begin{pmatrix} \rho_{i\pm 1} \pm \delta_{num} \\ \pm \delta_{num} \\ \pm \delta_{num} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \rho_{i\pm 1} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Zur Erhaltung der Informationen der Toruskrümmung beim Wandaufprall werden die Rückrotationen nicht nur auf den Positionsvektor entlang von Torusoberflächen, sondern auch auf den Geschwindigkeitsvektor \vec{v} und den assoziierten Wandreflektionsvektor v_{refl} angewandt.

Der bei den Rotationen begangene numerische Fehler kann zwar aufgrund der exakten Kenntnis der Zell- und Zellwandpositionen für die Ortsvektoren korrigiert werden, pflanzt sich mit kleinsten Abweichungen bei jeder Rotation in den Geschwindigkeitsvektoren fort. Der Einfallswinkel beim Wandaufprall (γ) wird dadurch zwar mit kontinuierlich mit kleinsten Fehlern behaftet, allerdings sind diese vernachlässigbar klein, verglichen mit jenen Fehlern, die bei der Berechnung der winkel- und energieabhängigen Zerstäubungsraten aus den *Eckstein-Tableaus* begangen Fehler. In diesen Tabellen werden Zerstäubungsraten für bestimmte Energie- und Winkelkombinationen angegeben.[35]

Die Tabellendaten werden beim Wandaufprall in CELLSOR linear interpoliert.¹

¹Da der CX-Stoß einerseits isotrop stattfindet, die Eindringtiefe für Stöße andererseits durch Lösen eindimensionaler Gleichungen ermittelt wird, ist die resultierende Winkelverteilung eine gute, aber nicht-exakte Näherung.

B.2. Lösung der Kontinuitätsgleichung im SOL: Variation der Konstanten

Zur Lösung von Gl. 4.71 durch Variation der Konstanten, werden zunächst dimensionslose Variablen gebildet, also

$$s = \frac{x}{x_{wall}}, \quad \eta = \frac{n}{n_{sep}}. \quad (\text{B.2})$$

Die *Kontinuitätsgleichung* lautet dann

$$\frac{d^2\eta}{ds^2} - \frac{x_{wall}v_{\perp}}{D_{\perp}} \frac{d\eta}{ds} = \frac{x_{wall}^2}{\tau_{loss}D_{\perp}} \eta - \frac{x_{wall}^2 S}{n_{sep}D_{\perp}}. \quad (\text{B.3})$$

Die Randbedingungen lauten nun

$$s = 0 : \eta = 1, \quad s = 1 : \eta + \frac{\delta}{x_{wall}} \frac{d\eta}{ds} = 0. \quad (\text{B.4})$$

Sowohl die Parameter für den Transport senkrecht zu den magnetischen Feldlinien, i.e. die Diffusivitätskonstante D_{\perp} und die konvektive Geschwindigkeit v_{\perp} , als auch die volumetrische Ionisationsquelle S werden substituiert zu

$$p = \frac{\Delta_{SOL}v_{\perp}}{2D_{\perp}}, \quad q = \frac{\Delta_{SOL}^2}{D_{\perp}\tau_{loss}}, \quad \sigma = \frac{\Delta_{SOL}S}{\Gamma_{\perp}}. \quad (\text{B.5})$$

Die Normierung der Quelle auf den an dieser Stelle unbekanntem (Wand-)Fluss Γ_{\perp} ist notwendig, damit das (ebenso normierte) Neutraldichteprofil aus CELLSOR-Rechnungen zur Bestimmung des *Ionisationsquellterms* herangezogen werden kann.

Für den Wandfluss gilt nun:

$$\Gamma_{\perp} = \frac{D_{\perp}n_{sep}}{\Delta_{SOL}} \left[-\frac{d\eta}{ds}(1) + 2p\eta(1) \right] = \frac{D_{\perp}n_{sep}}{\Delta_{SOL}} \left(\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + 2p \right) \eta(1). \quad (\text{B.6})$$

Damit wird Gl. B.3 zu

$$\frac{d^2\eta}{ds^2} - 2p \frac{d\eta}{ds} - q\eta = -\chi\eta(1)\sigma, \quad (\text{B.7})$$

mit

$$\chi = \frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + 2p. \quad (\text{B.8})$$

B.2.1. Lösungen der homogenen Gleichung

Der Ansatz für die linear unabhängigen Lösungen der homogenen Gleichung, i.e.

$$\frac{d^2\eta_{1,2}}{ds^2} - 2p \frac{d\eta_{1,2}}{ds} - q\eta_{1,2} = 0, \quad (\text{B.9})$$

lautet

$$\eta_{1,2} = \exp(\lambda_{1,2}s), \quad (\text{B.10})$$

woraus sich

$$\lambda_{1,2} - 2p\lambda_{1,2} - q = 0; \quad \lambda_{1,2} = p \pm \sqrt{p^2 + q} \quad (\text{B.11})$$

ergibt.

B.2.2. Lösungen der inhomogenen Gleichung

Für die inhomogene Gleichung wird

$$\eta = v_1\eta_1 + v_2\eta_2 \quad (\text{B.12})$$

angesetzt. Die Ableitung lautet

$$\frac{d\eta}{ds} = v_1\lambda_1\eta_1 + v_2\lambda_2\eta_2 + \frac{dv_1}{s}\eta_1 + \frac{dv_2}{s}\eta_2. \quad (\text{B.13})$$

Diese verschwindet wahlweise:

$$\frac{dv_1}{s}\eta_1 + \frac{dv_2}{s}\eta_2 = 0, \quad (\text{B.14})$$

sodass

$$\frac{d\eta}{ds} = v_1\lambda_1\eta_1 + v_2\lambda_2\eta_2, \quad (\text{B.15})$$

sowie für die Differentialgleichung:

$$\frac{d^2\eta}{ds^2} = \frac{dv_1}{ds}\lambda_1\eta_1 + \frac{dv_2}{ds}\lambda_2\eta_2v_1\lambda_1^2\eta_1 + v_2\lambda_2^2\eta_2. \quad (\text{B.16})$$

Anschließend wird η in die Gleichung substituiert, i.e.

$$\frac{dv_1}{ds}\lambda_1\eta_1 + \frac{dv_2}{ds}\lambda_2\eta_2 = -\chi\eta(1)\sigma, \quad (\text{B.17})$$

woraus gemeinsam mit

$$\frac{dv_1}{ds}\eta_1 + \frac{dv_2}{ds}\eta_2 = 0 \quad (\text{B.18})$$

die Ableitungen von v_1 und v_2 folgen:

$$\frac{dv_1}{ds} = -\frac{\chi\eta(1)\sigma}{(\lambda_1 - \lambda_2)\eta_1} = -\eta(1)\frac{\chi\sigma \exp(-\lambda_1 s)}{2\sqrt{p^2 + q}}, \quad (\text{B.19})$$

sowie

$$\frac{dv_2}{ds} = \frac{\chi\eta(1)\sigma}{(\lambda_1 - \lambda_2)\eta_2} = \eta(1)\frac{\chi\sigma \exp(-\lambda_2 s)}{2\sqrt{p^2 + q}}. \quad (\text{B.20})$$

Die Lösungen von Gl. B.19 und B.20 folgen durch Integration:

$$v_1(s) = C_1 + \eta(1)\Psi_1(s), \quad v_2(s) = C_2 - \eta(1)\Psi_1(s), \quad (\text{B.21})$$

mit

$$\Psi_{1,2}(s) = \frac{\chi}{2\sqrt{p^2 + q}} \int_s^1 ds \sigma \exp(-\lambda_{1,2}s). \quad (\text{B.22})$$

Die allgemeine Lösung der inhomogenen Gleichung lautet folglich

$$\eta = [C_1 + \eta(1)\Psi_1(s)] \exp(\lambda_1 s) + [C_2 - \eta(1)\Psi_2(s)] \exp(\lambda_2 s). \quad (\text{B.23})$$

Die Koeffizienten C_1 und C_2 in Gl. B.23 können durch Einsetzen der Randbedingungen, i.e.

$$s = 0 : \eta = 1 \rightarrow C_1 + C_2 = 1 + \eta(1) [\Psi_2(0) - \Psi_1(0)], \quad (\text{B.24})$$

sowie

$$s = 1 : \eta + \frac{\delta}{\Delta_{SOL}} \frac{d\eta}{ds} = 0 \rightarrow C_1 + C_2 \exp(\lambda_2 - \lambda_1) \frac{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_2}{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_1} = 0, \quad (\text{B.25})$$

ermittelt werden, da zusätzlich per Definition gilt:

$$s = 1 : \eta = \eta(1) \rightarrow \eta(1) = C_1 + C_2 \exp(\lambda_2 - \lambda_1) = C_2 \exp(\lambda_2 - \lambda_1) \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_1}. \quad (\text{B.26})$$

Die Koeffizienten lauten schliesslich

$$C_2 = \left[1 - \frac{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_2 + (\lambda_1 - \lambda_2) [\Psi_2(0) - \Psi_1(0)]}{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_1} \exp(\lambda_2 - \lambda_1) \right]^{-1} \quad (\text{B.27})$$

und

$$C_1 = -C_2 \exp(\lambda_2 - \lambda_1) \frac{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_2}{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_1}, \quad (\text{B.28})$$

mit

$$\eta(1) = -C_2 \exp(\lambda_2 - \lambda_1) \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\frac{\Delta_{SOL}}{\delta} + \lambda_1}. \quad (\text{B.29})$$

B.3. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Thompson-Verteilung

Die Mechanik des *Monte-Carlo* Codes CELLSOR ERO, welcher mit erodierten Wolframatomten als startende *Testteilchen* rechnet, wird in Kap. 4.4 beschrieben. Die Teilchen starten dabei mit einer $\cos(\theta)$ -Winkelverteilung und einer *Thompson-Energieverteilung*. Die *Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion* (*pdf*) einer *Thompson-Verteilung* wird anhand von Gl. 4.56 bestimmt.

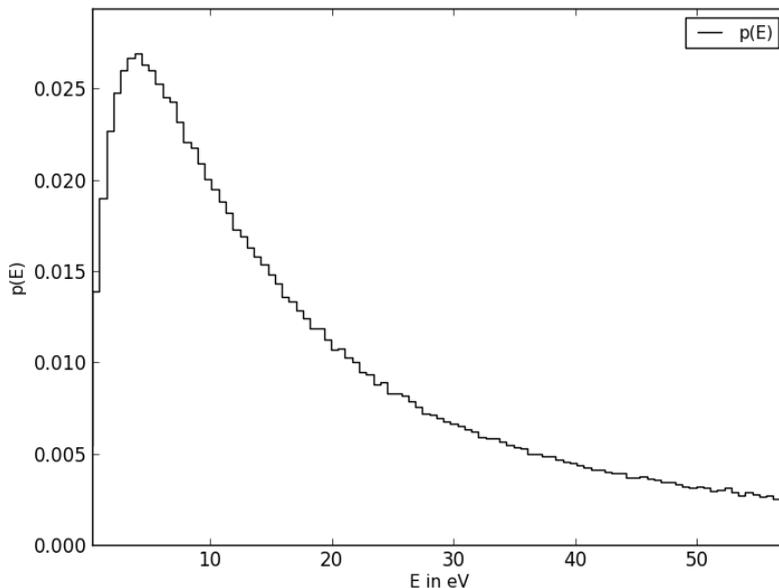


Abbildung B.1.: Generierte *pdf* in Form eines normierten Häufigkeitshistogramms von Thompson-verteilten Startenergien von Wolframatomten, welche durch 100 eV Projektile (D) erodiert wurden.

Abb. B.1 zeigt die mit CELLSOR ERO generierte *pdf* einer *Thompson-Verteilung* für erodiertes Wolfram, im Falle der Erosion durch Deuteriumprojektile mit einer Energie von 100 eV.

B.4. Zuweisung von Zellnummern

Zellen und Zellwände werden nicht nur durch ihren Radius im poloidalen Querschnitt identifiziert, sondern auch mit positiven natürlichen Zahlen durchnummeriert. Die äußerste Zellwand bei ρ_{wall} (Position der ersten Wand) wird mit $j = 0$ nummeriert und dann aufsteigend ganzzahlig erhöht für jede weitere Zellwand bei $\rho_{wall} - j\Delta_{cell}$. Die erste Zelle wird mit $i = 0$ bei $\rho_{wall} - \Delta_{cell}/2$ gezählt und dann jeweils zum Plasmazentrum hin bei den Radien $\rho_{wall} - i\Delta_{cell}/2$ ganzzahlig erhöht. beim Passieren einer Zelle, d.h. dem Erreichen der benachbarten Zellwand, wird die passierte Zelle anhand von p_{new} ermittelt. Falls $(p_{new,x} - R) < \rho_{cell}^2$, $i = i + 1$, andernfalls $i = i - 1$.

²Bei Rechnungen ohne Rückrotationen wird anstelle der x-Komponente des neuen Positionsvektors \vec{p}_{new} , dessen Länge verwendet, d.h. $|\vec{p}_{new}| - R < \rho_{cell}$.

B.5. Test der Verwerfungsmethode nach Cupini et al.

In Kap. 4 wird die Modellierung der *Plasma-Wand-Wechselwirkung* im Hauptraum der Brennkammer eines Fusionsreaktors beschrieben. Abschn. 4.2 ist der Beschreibung der Schädigung durch Neutralteilchen gewidmet, welche mithilfe des Monte-Carlo Codes CELLSOR erfolgt. Entscheidend ist dazu die Energieverteilung von Neutralteilchen, welche durch CX-Stöße in heißen Plasmaregionen *geboren* werden. Wechselwirkungen zwischen Testteilchen und Hintergrundplasma werden im Unterabschn. 4.2.2 behandelt. Dieser beinhaltet auch die Beschreibung des *Samplings* des Geschwindigkeitsvektors der Testteilchen nach CX-Stößen.

Dabei gibt es drei Optionen wie CELLSOR jenen Vektor erzeugt. Diese werden in Kap. 5.1.1 aufgelistet. Die realistischste Beschreibung ist jene einer modifizierten *Maxwell-Boltzmann-Verteilung*, welche durch eine für Monte-Carlo Rechnungen entwickelte *Verwerfungsmethode* nach Cupini et al. implementiert wurde.[29] In diesem Abschnitt wird nun anhand zweier spezifischer

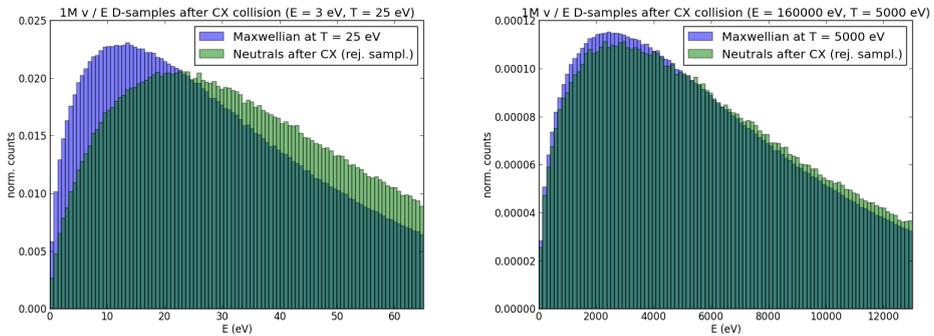


Abbildung B.2.: Vergleich zwischen einer Millionen Samples einer modifizierten / unmodifizierten *Maxwell-Boltzmann-Verteilung*; generiert mit der CELLSOR-Implementierung für H bei $E = 3 \text{ eV}$ (links) / 5 keV (rechts) und $T = 25 \text{ eV}$ (links) / 160 keV (rechts). Die Histogramme sind auf relative Häufigkeiten in den Energiebereichen normiert.

Verteilungen, i.e. bei 3 eV / 5 keV in ein 25 eV / 160 keV heißes Plasma injizierte Neutrale, welche mithilfe des in CELLSOR implementierten Moduls `sigv_CX_rejection` generiert wurden, gezeigt, dass diese den von Cupini et al. gezeigten Verteilungen (Abbildung 1 / 3) entsprechen.[29] Das Ziel ist die Verifizierung des CELLSOR-Moduls `sigv_CX_rejection`.

Abb. B.2 zeigt die Histogramme von jeweils einer Millionen Samples, welche mit der CELLSOR-Implementierung erzeugt wurden. Die Verteilungen entsprechen jenen aus Abbildung 1 und 3 in der Arbeit von Cupini et al., dort kontinuierlich dargestellt durch eine durchgezogene und eine gestrichelte Linie, welche den Energien einer *Maxwell-Boltzmann-Verteilung* sowie der mit der *Verwerfungsmethode* generierten Verteilung (nach einem Stoß) entsprechen.

B.6. CELLSOR-Rechnung des Ablationsprofils bei Pelletinjektion

In Kap. 4.2.4 wird ein Modell zur Beschreibung der Ablationsrate in Abhängigkeit von typischen Plasmaparametern beschrieben.

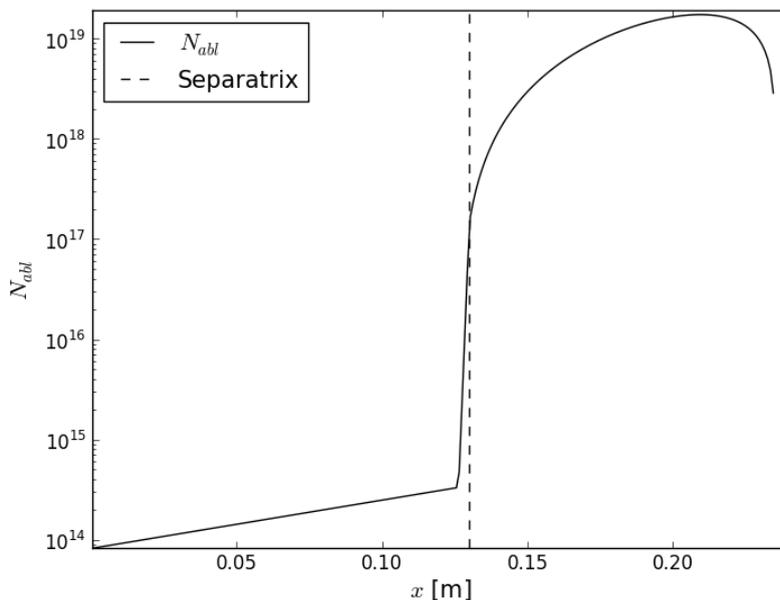


Abbildung B.3.: Gerechnetes Ablationsprofil für eine Pelletinjektion von der oberen Mittelebene der Niedrigfeldseite; $x = 0$: Position der ersten Wand.

Abb. B.3 zeigt das mit CELLSOR gerechnete (Gleichungen 4.36 - 4.40) Ablationsprofil für ein DT-Brennstoffpellet, welches mit 20 Hz und 1000 m/s in einen DEMO-Reaktor mit $a = 2,643$ m, $\Delta_{SOL} = 0,13$ m und $P_{Fus} = 2,5$ GW (bei $c_{He} = 0,05$) geschossen wurde.

B.6.1. Quellprofil der Kontinuitätsgleichung

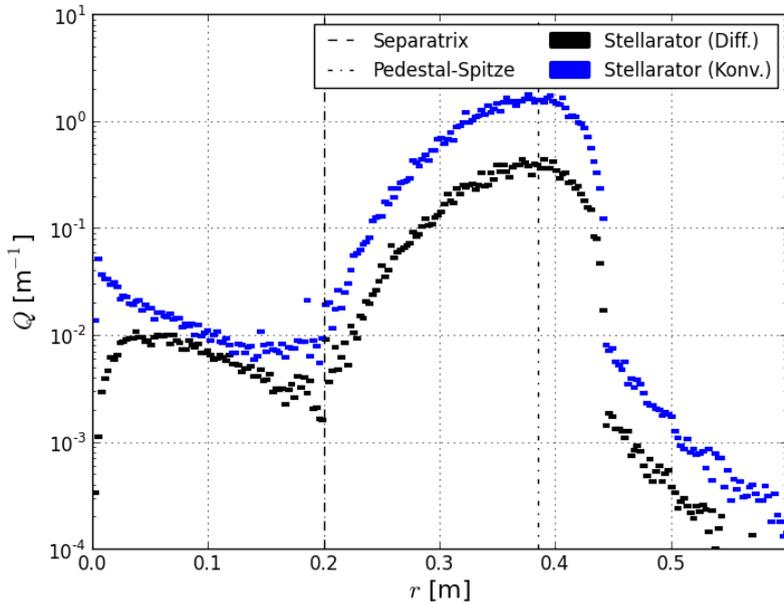


Abbildung B.4.: Finales Volumen-Quellprofil $Q(x)$ des Stellarator-Testfalls.

Abb. B.4 zeigt das finale Volumen-Quellprofil $Q(x)$ des *Stellaratorfalls*. Innerhalb des SOL *peakt* das Profil insbesondere im konvektiven Transportfall im wandnahen, äußeren SOL. Bei Betrachtung des gesamten Plasmaquerschnitts liegt der Hauptpeak asymmetrisch auf Höhe der Pedestalspitze, mit einem steileren Abfall in Richtung Kernplasma und einem verbreiterten Abfall innerhalb des Pedestals bis zur Separatrix.

Anhang C.

Sonstiges

C.1. Tritiumbedarf eines Kernfusionskraftwerks

Der jährliche Tritium-Bedarf eines Kernfusionskraftwerks lässt sich leicht abschätzen. Abhängig von der geforderten Fusionsleistung P_{Fus} , die durch DT-Fusion im Kernplasma erzeugt werden soll, wird die Fusionsrate

$$\Phi_{DT} = \frac{P_{Fus}}{\Delta E_{DT}}, \quad (C.1)$$

mit P_{Fus} in W und $\Delta E_{DT} = 17,6 \text{ MeV} \approx 2,898 \cdot 10^{-12}$ benötigt. Bei jedem Fusionsereignis geschieht die Umwandlung $D + T \rightarrow n + {}^4\text{He}$, d.h. geht dem System ein Tritiumkern verloren. Für ein Kraftwerk mit $P_{Fus} = 2 \text{ GW}_{th}$ folgt also, dass $\Phi_{DT} = 7,09 \cdot 10^{20}$ DT-Fusionsereignisse pro Sekunde erforderlich sind. Ein vollständiges Betriebsjahr (engl.: *full power year*, kurz: fpy) besteht aus

$$t_{fpy} = 365 \text{ d} \cdot 24 \text{ h} \cdot 60 \text{ min} \cdot 60 \text{ s} = 3,15 \cdot 10^7 \text{ s}, \quad (C.2)$$

d.h. es werden $t_{fpy} \cdot \Phi_{DT} = 2,24 \cdot 10^{28}$ verbrannte Tritiumkerne pro Betriebsjahr benötigt. Ein Tritiumkern besteht aus einem Proton und zwei Neutronen, i.e. seine Masse ist:

$$m_T = 2m_n + m_p = 2 \cdot 1,675 \cdot 10^{-27} \text{ kg} + 1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 5,022 \cdot 10^{-27} \text{ kg}. \quad (C.3)$$

Folglich werden pro Betriebsjahr $2,24 \cdot 10^{28} \cdot 5,022 \cdot 10^{-27} \text{ kg T} \approx 112 \text{ kg T}$ benötigt. Als leicht zu merkende Faustformel kann dies zu 56 kg T pro GW Fusionsleistung und pro Betriebsjahr abgespeichert werden.

C.2. Zeitliche Entwicklung des Fusionsprodukts

Eine der wichtigsten Kenngrößen auf dem Weg zu einem Tokamak mit positiver Energiebilanz, ist das Tripelprodukt (auch Fusionsprodukt) $nT\tau_E$ aus Dichte, Temperatur und Energieeinschlusszeit.

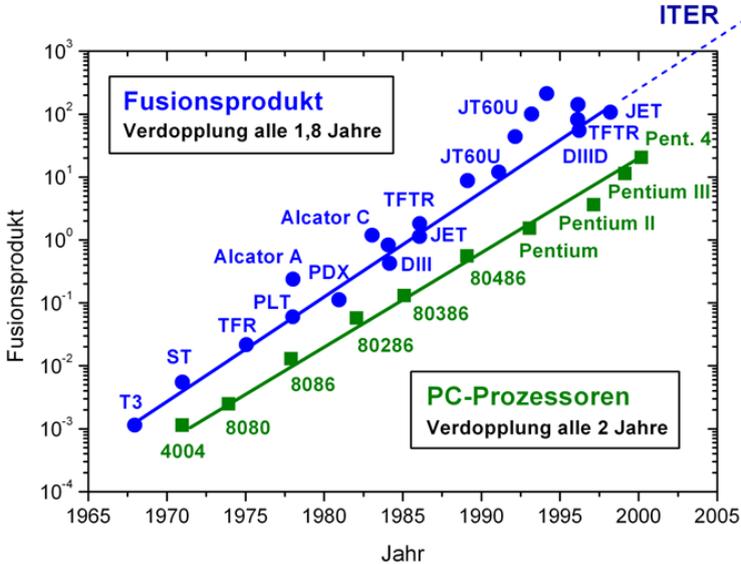


Abbildung C.1.: Entwicklung des Tripelprodukts $nT\tau_E$ sowie der Rechenleistung von Computern über 5 Jahrzehnte.

Abb. C.1 zeigt die Entwicklung des Fusionsprodukts sowie der Rechenleistung von Computern von 1965 bis 2000.

C.3. Erweiterungen des $IPB98(y,2)$ Skalierungsgesetzes

In Kap. 3.2 wurde der Transport sowie der Betriebsmodus mit H-Moden-Einschlussgüte vorgestellt. Dabei wurde das am weitesten verbreitete *Multi-Maschinen-Skalierungsgesetz* für die Energieeinschlusszeit τ_E vorgestellt, i.e. das $IPB98(y,2)$ -Skalierungsgesetz (Gl. 3.19). An dieser Stelle werden Korrekturen diskutiert, welche empirisch durch Observierungen bei Plasmaentladungen mit hohen Dichteleveln und stärker gespitztem Dichteprofil im Kernplasma, beim Betrieb der Tokamaks AUG und JET gefunden wurden.

C.3.1. Stark abstrahlende Kernplasmen

Obwohl die $IPB98(y,2)$ -Skalierung (Gl. 3.19) häufig angewandt wird, bleiben Restzweifel ob der zuverlässigen Skalierbarkeit hin zu DEMO-relevanten Kernplasmen, welche hohe Dichten sowie eine starke Abstrahlung aufweisen. Dies bezieht sich vorwiegend auf den Parameter der Verlustleistung P_L , dessen Daten bolometrisch erfasst wurden. Die Strahlungspegel während der Plasmapulse, die zur Gewinnung der Skalierung herangezogen wurden, waren vergleichsweise gering.

Die $IPB98(y,2)$ -Skalierung besagt logischerweise, dass der Energieeinschluss bei steigender Verlustleistung sinkt. Aufgrund der niedrigen Abstrahlung in den betrachteten Plasmapulsen, wurde die Verlustleistung nicht in Transport- bzw. Abstrahlungsanteile aufgeteilt. Um also aus der $IPB98(y,2)$ -Skalierung Rückschlüsse auf den *anormalen Transport* ziehen zu können, muss die abgestrahlte Verlustleistung für DEMO-Plasmen separat abgeschätzt und von P_L abgezogen werden.

C.3.2. Dichte-Roll-Over und Einschlussverbesserung

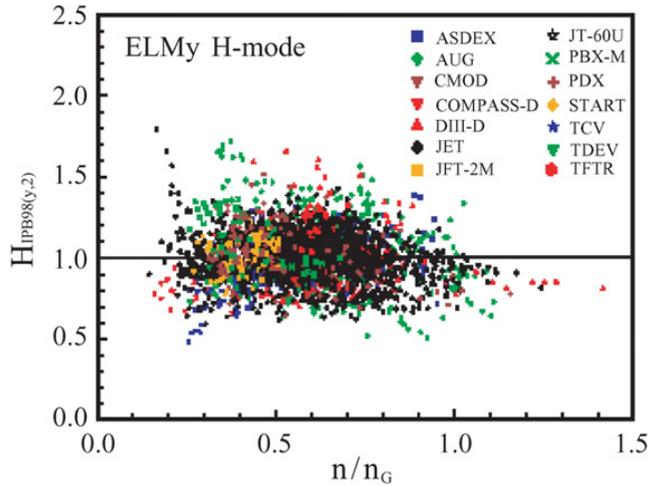


Abbildung C.2.: Einschlussverbesserungsfaktor $H_{H98(y,2)} = \tau_{th}/\tau_{E_{IPB98(y,2)}}$ vs. n/n_{GW} . [33]

Einige Zeit nach der Etablierung der $IPB98(y,2)$ -Skalierung, wurde für hochdichte H-Moden-Plasmen beobachtet, dass die zuvor ermittelte Abhängigkeit, i.e.

$$\tau_{IPB98(y,2)} \propto n_{20}^{0.41}, \text{ für } n/n_{GW} > 0.8 \quad (C.4)$$

verloren geht (Abb. C.2). Dieser Effekt wird als *Dichte-Roll-Over* bezeichnet.

Zusätzlich zu diesem Verhalten wurde beobachtet, dass die Separatrixdichte den Wert der *Greenwald-Dichte* dann überschreiten kann, wenn das Dichteprofil im Plasmakern stark gespitzt ist (d.h. eine tiefe Brennstoffzufuhr durch Pellets verwendet wird), i.e. mit hohem *Dichte-Peakingfaktor* α_n . Beim Betrieb der Tokamaks DIII-D und JET mit hohem *Dichte-Peaking* wurde von Mahdavi *et al.* und Valovic *et al.* ein zusätzlicher Anstieg der *Energieeinschlussgüte* beobachtet. [98?]

Zur Korrektur der $IPB98(y,2)$ -Skalierung um die beiden gegenläufigen Effekte des *Dichte-Roll-Over* bei hoher mittlerer Dichte $n/n_{GW} > 0.8$, sowie der *Einschlussverbesserung* bei starkem *Dichte-Peaking* α_n , wurde die globale $IPB98(y,2)$ -Skalierung (Gl. 3.19) durch Hinzunahme eines *Einschlussverbesserungsfaktors* ($H_{H98(y,2)}$) korrigiert: [33]

$$H_{H98(y,2)} = 1 - 0.07N_{GW} + 0.17\gamma_n, \quad (C.5)$$

mit $N_{GW} = \bar{n}/n_{GW}$: *Greenwald-Zahl*, $\gamma_n = (n_0/n_{GW} + \bar{n} / \langle n \rangle) / 2$: genereller *Dichte-*

Peakingfaktor mit n_0 : Dichtewert im Plasmazentrum, \bar{n} : liniengemittelte Dichte und $\langle n \rangle$: volumengemittelte Dichte.

Beim aktuellen DEMO1-*Baseline Design* liegt der *Einschlussverbesserungsfaktor* bei $H_{H98(y,2)} \approx 1.1$. Ein Pellet-Injektionssystem könnte daher - aufgrund des ermöglichten Dichte-Peakings - eines der Schlüsselsysteme für DEMO1 darstellen. Die korrigierte Skalierung der Energieeinschlusszeit lautet also:

$$\tau_{E_{IPB98(y,2),enhanced}} = H_{H98(y,2)} \cdot \tau_{E_{IPB98(y,2)}}. \quad (C.6)$$

C.3.3. Ungelöste Probleme der IPB98(y,2)-Skalierung

Auch das korrigierte Skalierungsgesetz (Gl. C.6) wird weiterhin in seiner Zuverlässigkeit für Extrapolationen zu hochdichten ITER- sowie DEMO-artigen Kernplasmen in Frage gestellt. Luce *et al.* warfen die Frage auf, ob ein Skalierungsgesetz basierend auf Ingenieursparametern, in der Lage sein kann, Effekte der Plasmaphysik, also neben der höheren Abstrahlung auch der Übergänge des Transportregimes hin zu starker Wärmeleitung bei sehr heißen Plasmen, abzubilden.[?]

Möglicherweise können beobachtete Unterschiede des Energieeinschlusses zwischen Experiment und Skalierungsgesetz durch die Hinzunahme eines oder mehrerer zusätzlicher Parameter, welche sich auf das Plasma beziehen, ausgeglichen werden. Dabei werden drei mögliche Parameter diskutiert:

- das Verhältnis zwischen Elektronen- und Ionentemperatur T_e/T_i
- die Plasmarotation,
- und das q -Profil,

höchst wahrscheinlich sogar eine Kombination aus diesen drei. Fraglich verbleibt dann weiterhin, inwiefern 0d *Proxies* gefunden werden können, die dabei helfen, ein nochmalig verfeinertes Skalierungsgesetz zu bestimmen.

C.4. Zerstäubungskurve für $W^+ \rightarrow W$ nach Eckstein

In Kap. 4.4.5 wird die *Selbstzerstäubung* durch erodiertes und prompt auf die erste Wand zurückkehrendes Wolfram diskutiert.

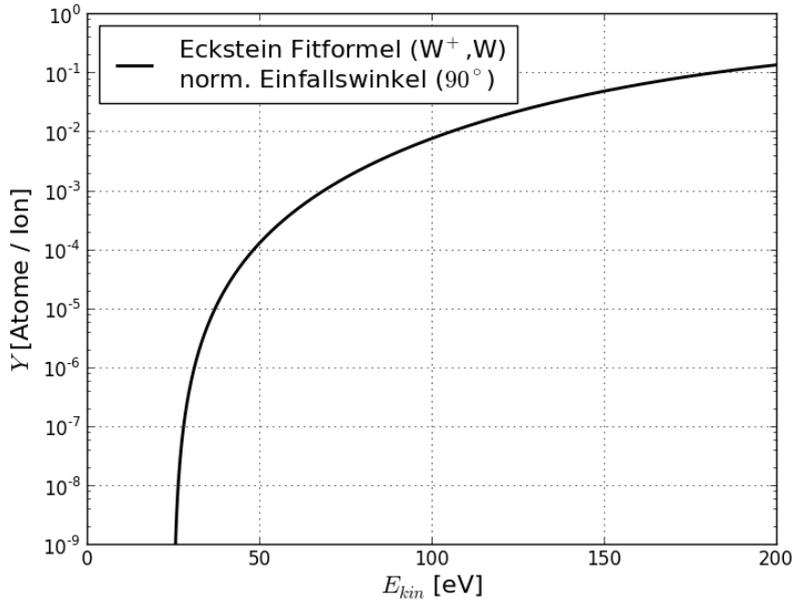


Abbildung C.3.: Errechnete Zerstäubungsausbeute $Y(E, \theta = 90^\circ)$ für $W^+ \rightarrow W$; unter Verwendung der Fitformel nach Eckstein (Seite 142, IPP Report aus 2007 [36]).

Abb. C.3 zeigt ergänzend dazu den Verlauf der *Zerstäubungsausbeute* für $W^+ \rightarrow W$ in Abhängigkeit der Projektilenergie E , im Falle normalen Auftreffwinkels, i.e. $\theta = 90^\circ$. Die Energieschwelle für Zerstäubung liegt bei einer Projektilenergie von $E \approx 25$ eV. Zu erhöhter Zerstäubung, i.e. $Y(E) \geq 10^{-3}$, kommt es ab Projektilenergien von $E \geq 70$ eV.

Literaturverzeichnis

- [1] M. A. Abdou et al., *Deuterium-Tritium Self-Sufficiency in Fusion Reactors*, Fusion Technology, 9 (1986), pp. 250–285.
- [2] M. I. Airila et al., *Improvement of surface processes modelling in the ERO code*, Journal of Nuclear Materials, 390-391 (2009), pp. 175–178.
- [3] F. Albajar et al., *Improved calculation of synchrotron radiation losses in realistic tokamak plasmas*, Nuclear Fusion, 41 (2001), pp. 665–678.
- [4] M. Andersen et al., *Surface Roughening Mechanisms for Tungsten exposed to LASER, Ion, and X-Ray Pulses*, Fusion Science and Technology, 52 (2007), pp. 579–583.
- [5] M. Baelmans et al., *Efficient code simulation strategies for B2-EIRENE*, Nuclear Materials and Energy, 12 (2016), pp. 858–863.
- [6] M. Beckers et al., *Investigations of the first-wall erosion of DEMO with the CELLSOR code*, Nuclear Materials and Energy, 12 (2017), pp. 1163–1170.
- [7] R. Behrisch et al., *Material erosion at the vessel walls of future fusion devices*, Journal of Nuclear Materials, 313-316 (2003), pp. 388 – 392.
- [8] G. Benedek and U. Valbusa, *Dynamics of Gas-Surface Interaction*, no. 21 in Springer Series in Chemical Physics, Springer, 1981.
- [9] M. Bernert et al., *Power exhaust by SOL and pedestal radiation at ASDEX Upgrade and JET*, Nuclear Materials and Energy, 12 (2017), pp. 111–118.
- [10] W. Biel et al., *Systems code studies on the optimization of design parameters for a pulsed DEMO tokamak reactor*, Fusion Engineering and Design, 123 (2017), pp. 206–211.
- [11] L. Boccaccini et al., *Objectives and status of EUROfusion DEMO blanket studies*, Fusion Engineering and Design, 109-111, Part B (2016), pp. 1199 – 1206.
- [12] H. Bolt et al., *Materials for the plasma-facing components of fusion reactors*, Journal of Nuclear Materials, 329-333 (2004), pp. 66–73.
- [13] B. J. Braams, *Computational studies in tokamak equilibrium and transport*, PhD thesis, Utrecht University, 1986.
- [14] B. J. Braams, *A Multi-Fluid Code for Simulation of the Edge Plasma in Tokamaks*, NET-Report 68, University of Utrecht, 1987. <http://www.eirene.de/Braams-NET-report.pdf> (Stand: 16.11.2017).
- [15] B. J. Braams, *Radiative Divertor Modelling for ITER and TPX*, Contrib. Plasma Phys., 36 (1996), pp. 276–281.
- [16] A. Bradshaw et al., *Is nuclear fusion a sustainable energy form?*, Fusion Engineering and Design, 86 (2011), pp. 2770 – 2773.
- [17] S. I. Braginskii, *Transport Processes in a Plasma*, Reviews of Plasma Physics, 1 (1965), pp. 205.

- [18] D. Breitschwerdt et al., *The locations of recent supernovae near the Sun from modelling ^{60}Fe transport*, Nature, 532 (2016), pp. 73–76.
- [19] Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), *Energiestudie 2015. Reserven, Ressourcen und Verfügbarkeit von Energierohstoffen*. https://www.bgr.bund.de/DE/Themen/Energie/Downloads/Energiestudie_2015.pdf (Auf-ruf: 16.11.2017).
- [20] L. Buzi et al., *Response of tungsten surfaces to helium and hydrogen plasma exposure under ITER relevant steady state and repetitive transient conditions*, Nuclear Fusion, 57 (2017), pp. 126009.
- [21] A. G. W. Cameron, *Abundances of the Elements in the Solar System*, Space Science Re-views, 15 (1970), pp. 121–146.
- [22] D. Carralero et al., *Implications of high density operation on SOL transport: A multima-chine investigation*, Journal of Nuclear Materials, 463 (2015), pp. 123–127.
- [23] H.-K. Chung et al., *FLYCHK: Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements*, High Energy Density Physics, 1 (2005), pp. 3–12.
- [24] J. Cordey et al., *A two-term model of the confinement in ELMy H-modes using the global confinement and pedestal databases*, Nuclear Fusion, 43 (2003), pp. 670.
- [25] H. Craig, *Standard for Reporting Concentrations of Deuterium and Oxygen-18 in Natural Waters*, Science, 133 (1961), pp. 1833–1834.
- [26] I.-R. Cristescu et al., *Tritium inventory assessment for ITER using TRIMO*, Fusion En-gineering and Design, 81 (2006), pp. 763–769.
- [27] G. Cseh et al., *Pellet cloud characterisation, scaling and estimation of the material- and temperature distribution inside the cloud*, Nucl. Fusion, 57 (2017), pp. 14.
- [28] E. Cupini, *Nimbus: Monte Carlo Simulation of Neutral Particle Transport in Fusion De-vices - Part One, Physical Model and Numerical Method*, Brussels: Commission of the European Communities, 1983.
- [29] E. Cupini et al., *Monte Carlo Simulation of the Charge-Transfer Reaction in a Plasma*, Journal of Computational Physics, 52 (1983), pp. 122–129.
- [30] P. T. Dawson and S. A. Petrone, *Preferential sputtering and surface segregation in tungsten-molybdenum alloys*, J. Vac. Sci. Technol., 18 (1980), pp. 529–532.
- [31] P. de Vries et al., *Survey of disruption causes at JET*, Nuclear Fusion, 51 (2011), pp. 053018.
- [32] A. Del Nevo et al., *WCLL breeding blanket design and integration for DEMO 2015: status and perspectives*, Fusion Engineering and Design, 124 (2017), pp. 682–686.
- [33] E. Doyle et al., *ITER Physics Basis Chapter 2: Plasma Confinement and Transport*, Nucl. Fusion, 47 (2007), pp. 18–127.
- [34] R. Dux, *Impurity Transport in Tokamak Plasmas*, Habilitationsschrift, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, D-85748 Garching, Assoziation EURATOM-IPP, 2004.

-
- [35] W. Eckstein, *Calculated Sputtering, Reflection and Range Values*, tech. rep., Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Boltzmannstr. 2, D-85748 Garching, 2002.
- [36] W. Eckstein, *Sputtering Yields*, tech. rep., Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Boltzmannstr. 2, D-85748 Garching, 2007.
- [37] A. Edelman and H. Murakami, *Polynomial Roots From Companion Matrix Eigenvalues*, *Mathematics of Computation*, 64 (1995), pp. 763–776.
- [38] C. Eibl and A. Winkler, *Angular and energy distributions of D₂-molecules desorbing from sulfur and oxygen modified V(111) surfaces*, *Journal of Chemical Physics*, 117 (2002), pp. 834–841.
- [39] T. Eich et al., *Scaling of the tokamak near the scrape-off layer H-mode power width and implications for ITER*, *Nucl. Fusion*, 53 (2013), pp. 1–7.
- [40] D. Fasel and M. Tran, *Availability of lithium in the context of future D-T fusion reactors*, *Fusion Engineering and Design*, 75-79 (2005), pp. 1163 – 1168.
- [41] G. Federici et al., *Plasma-material interactions in current tokamaks and their implications for next step fusion reactors*, *Nuclear Fusion*, 41 (2001), pp. 1967.
- [42] G. Federici et al., *Overview of EU DEMO design and R&D activities*, *Fusion Engineering and Design*, 89 (2014), pp. 882–889.
- [43] G. Federici et al., *Overview of the design approach and prioritization of R & D activities towards an EU DEMO*, *Fusion Engineering and Design*, 109-111, Part B (2016), pp. 1464 – 1474.
- [44] P. Franzen and U. Fantz, *On the NBI system for substantial current drive in a fusion power plant: Status and R and D needs for ion source and laser neutralizer*, *Fusion Engineering and Design*, 89 (2014), pp. 2594–2605.
- [45] J. P. Freidberg, *Plasma Physics and Fusion Energy*, Cambridge University Press, 2007.
- [46] G. Furchert et al., *Towards a quantitative prediction of the blob detection rate*, *Plasma Phys. Control. Fusion*, 58 (2016), pp. 8.
- [47] G. Fussmann et al., *High-Z Elements as Target Materials in Fusion Devices*, in *Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research*, vol. 2, Seville, Spain, September 1994, pp. 143–148.
- [48] G. Gamow, *Zur Quantentheorie des Atomkernes*, *Zeitschrift für Physik*, 51 (1928), pp. 204–212.
- [49] L. Garzotti et al., *Neutral gas and plasma shielding scaling law for pellet ablation in Maxwellian plasmas*, *Nuclear Fusion*, 37 (1997), pp. 1167–1175.
- [50] K. Gi et al., *Bootstrap current fraction scaling for a tokamak reactor design study*, *Fusion Engineering and Design*, 89 (2014), pp. 2709 – 2715.
- [51] L. Giannone et al., *Radiation power profiles and density limit with a divertor in the W7-AS stellarator*, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 44 (2002), pp. 2149.

- [52] P. Gleick, *Water Resources*, in Encyclopedia of Climate and Weather, S. H. Schneider, ed., vol. 2, Oxford University Press, New York, 1996, pp. 817–823.
- [53] M. Greenwald, *Density limits in toroidal plasmas*, Plasma Physics and Controlled Fusion, 44 (2002), pp. R27–R80.
- [54] M. Griebel et al., *Numerische Simulation in der Moleküldynamik - Numerik, Algorithmen, Parallelisierung, Anwendungen*, Springer, 2004.
- [55] C. Grosjean et al., *Assessment of world lithium resources and consequences of their geographic distribution on the expected development of the electric vehicle industry*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 16 (2012), pp. 1735–1744.
- [56] C. Guillemaut et al., *EDGE2D-EIRENE modelling of divertor detachment in JET high triangularity L-mode plasmas in carbon and Be/W environment*, Journal of Nuclear Materials, 438 (2013), pp. 638–642.
- [57] H. Guo, S. Zhu, and J. Li, *B2/EIRENE modeling of EAST divertor target power loading with enhanced wall carbon source and additional neon injection*, Journal of Nuclear Materials, 363-365 (2007), pp. 162–166.
- [58] D. Harting et al., *Simulation of tungsten sputtering with EDGE2D-EIRENE in low triangularity L-mode JET ITER like wall configuration*, Journal of Nuclear Materials, 438 (2013), pp. 480–483.
- [59] T. Hartmann, *Development of a Modular Systems Code to Analyse the Implications of Physics Assumptions on the Design of a Demonstration Fusion Power Plant*, PhD thesis, Technische Universität München, 2013.
- [60] D. Heifetz, *Neutral Particle Transport*, Journal of Computational Physics, 46 (1982), pp. 309.
- [61] P. Helander et al., *Stellarator and tokamak plasmas: a comparison*, Plasma Physics and Controlled Fusion, 54 (2012), pp. 1–12.
- [62] D. Herbison-Evans, *Solving Quartics and Cubics for Graphics*, Tech. Rep. 487, The University of Sydney - Basser Department of Computer Science, 1994.
- [63] E. M. Hollmann et al., *Measurement of parallel transport of B^+ and Al^{2+} impurities in a linear He^+ plasma*, Journal of Nuclear Materials, 415 (2011), pp. 425–229.
- [64] E. M. Hollmann, D. Humphreys, and P. Parks, *Simulation of main chamber wall temperature rise resulting from massive neon gas injection shutdown of ITER*, Nucl. Fusion, 52 (2012), pp. 1–7.
- [65] J. Houghton et al., *Implications of Proposed CO₂ Emissions Limitations*, IPCC Technical Paper IV, IPCC, October 1997.
- [66] M. Hughes and D. Post, *A Monte Carlo Algorithm for Calculating Neutral Gas Transport in Cylindrical Plasmas*, Journal of Computational Physics, 28 (1978), pp. 43–55.
- [67] ITER Physics Expert Group on Confinement and Transport, ITER Physics Expert Group on Confinement Modelling and Database, and ITER Physics Basis Editors, *Chapter 2: Plasma confinement and transport*, Nucl. Fusion, 39 (1999), pp. 2175–2249.

-
- [68] ITER Technical Basis, ITER EDA Documentation Series 24, IAEA, January 2002.
- [69] S. I. Itoh et al., *A theory of anomalous transport in H-mode plasmas*, Plasma Physics and Controlled Fusion, 36 (1994), pp. 261.
- [70] S. Jardin et al., *Physics basis for the advanced tokamak fusion power plant, ARIES-AT*, Fusion Engineering and Design, 80 (2006), pp. 25 – 62. Aries - AT Special Issue.
- [71] N. Jelic and L. Kos, *Ion-sound velocity at the plasma edge in fusion-relevant plasmas*, Nuclear Engineering and Design, 261 (2013), pp. 269 – 274.
- [72] J. Johnner, *HELIOS: A Zero-Dimensional Tool for Next Step and Reactor Studies*, Fusion Science and Technology, 59 (2011), pp. 308–349.
- [73] J. Jordanova et al., *Parametric neutronic analysis of HCLL blanket for DEMO fusion reactor utilizing vacuum vessel ITER FDR design*, Fusion Engineering and Design, 81 (2006), pp. 2213 – 2220.
- [74] J. Jordanova, U. Fischer, and P. Pereslavytsev, *Nuclear performance analyses design HCLL breeder blanket for a fusion power reactor*, Fusion Engineering and Design, 84 (2009), pp. 985 – 988.
- [75] M. Keilhacker, *H-mode confinement in tokamaks*, Plasma Physics and Controlled Fusion, 29 (1987), pp. 1401.
- [76] C. Kessel et al., *Plasma Profile and Shape Optimization for the Advanced Tokamak Power Plant, ARIES-AT*, PPPL Report 3573, Princeton Plasma Physics Laboratory, 2001.
- [77] A. Kirschner et al., *Simulation of the plasma-wall interaction in a tokamak with the Monte Carlo code ERO-TEXTOR*, Nuclear Fusion, 40 (2000), pp. 989–1001.
- [78] H.-J. Klingshirn, D. Coster, and X. Bonnin, *Advanced spatial discretizations in the B2.5 plasma fluid code*, Journal of Nuclear Materials, 438, Supplement (2013), pp. 856 – 860.
- [79] M. Kocan et al., *Intermittent transport across the scrape-off layer: latest results from ASDEX Upgrade*, Nuclear Fusion, 53 (2013), pp. 1–9.
- [80] J. Konys et al., *Status of Tritium Permeation Barrier Development in the EU*, Fusion Science and Technology, 47 (2005), pp. 844–850.
- [81] L. Kos, D. Tskhakaya, and N. Jelic, *Unified Bohm criterion*, Physics of Plasmas, 22 (2015), pp. 093503.
- [82] V. Kotov et al., *Numerical estimates of the ITER first wall erosion due to fast neutral particles*, Physica Scripta, T138 (2009), pp. 4.
- [83] M. Kovari et al., *PROCESS: A systems code for fusion power plants—Part 1: Physics*, Fusion Engineering and Design, 89 (2014), pp. 3054–3069.
- [84] M. Kovari et al., *PROCESS: A systems code for fusion power plants - Part 2: Engineering*, Fusion Engineering and Design, 104 (2016), pp. 9–20.
- [85] J. Kubát, *Determination of Atmospheric Parameters of B-, A-, F- and G-Type Stars*, Springer International Publishing Switzerland, 2014, ch. Basics of the NLTE Physics, pp. 149–157.

- [86] S. Kuhn et al., *Closure of the hierarchy of fluid equations by means of the polytropic-coefficient function (PCF)*, AIP Conference Proceedings, 1306 (2010), pp. 216.
- [87] B. LaBombard et al., *Particle transport in the scrape-off layer and its relationship to discharge density limit in Alcator C-Mod*, Physics of Plasmas, 8 (2001), pp. 2107–2117.
- [88] B. LaBombard et al., *Evidence for electromagnetic fluid drift turbulence controlling the edge plasma state in the Alcator C-Mod tokamak*, Nucl Fusion, 45 (2005), pp. 1658–1675.
- [89] P. Lang et al., *ELM pace making and mitigation by pellet injection in ASDEX Upgrade*, Nuclear Fusion, 44 (2004), pp. 665.
- [90] P. Lang et al., *High-density H-mode operation by pellet injection and ELM mitigation with the new active in-vessel saddle coils in ASDEX Upgrade*, Nuclear Fusion, 52 (2012), pp. 023017.
- [91] P. Lang et al., *ELM pacing and high-density operation using pellet injection in the ASDEX Upgrade all-metal-wall tokamak*, Nuclear Fusion, 54 (2014), pp. 083009.
- [92] C. Z. Li et al., *A repetitive pellet injection system for steady state fuelling in EAST superconducting tokamak*, Fusion Engineering and Design, 89 (2014), pp. 99 – 103.
- [93] B. Lipschultz et al., *Plasma surface interaction, scrape-off layer and divertor physics: implications for ITER*, Nuclear Fusion, 47 (2007), pp. 1189–1205.
- [94] B. Lipschultz et al., *An assessment of the current data affecting tritium retention and its use to project towards T retention in ITER*, tech. rep., Plasma Science and Fusion Center Massachusetts Institute of Technology Cambridge MA 02139 USA, April 2010.
- [95] S. Lisgo et al., *OSM-EIRENE modeling of neutral pressures in the Alcator C-Mod divertor*, Journal of Nuclear Materials, 337-339 (2005), pp. 139–145.
- [96] A. Litnovsky et al., *Smart alloys for a future fusion power plant: First studies under stationary plasma load and in accidental conditions*, Nuclear Materials and Energy, 12 (2016), pp. 1363–1367.
- [97] A. Loarte et al., *Chapter 4: Power and particle control*, Nuclear Fusion, 47 (2007), pp. 203–260.
- [98] M. Mahdavi et al., *High performance H mode plasmas at densities above the Greenwald limit*, Nuclear Fusion, 42 (2002), pp. 52.
- [99] D. Maisonnier et al., *Power plant conceptual studies in Europe*, Nuclear Fusion, 47 (2007), pp. 1524.
- [100] Y. R. Martin, T. Takizuka, and the ITPA CDBM H-mode Threshold Database Working Group, *Power requirement for accessing the H-mode in ITER*, Journal of Physics: Conference Series, 123 (2008), pp. 1–11.
- [101] E. K. Maschke, *Exact solutions of the MHD equilibrium equation for a toroidal plasma*, Plasma Physics, 15 (1973), pp. 535.
- [102] A. Mekkaoui et al., *Effect of Turbulent Fluctuations on Neutral Particle Penetration and Charge Exchange Sputtering*, Contrib. Plasma Phys., 54 (2014), pp. 409 – 414.

-
- [103] N. Mellet et al., *Magnetic sheath effect on the gross and net erosion rates due to impurities*, Phys. Scr., T167 (2016), pp. 1–5.
- [104] F. Militello, V. Naulin, and A. H. Nielsen, *Numerical scalings of the decay lengths in the scrape-off layer*, Plasma Phys. Control. Fusion, 55 (2013), pp. 1–8.
- [105] A. Mößlang, *IFMIF: the intense neutron source to qualify materials for fusion reactors*, Comptes Rendus Physique, 9 (2008), pp. 457 – 468.
- [106] H. Müller et al., *Far scrape-off layer particle and heat fluxes in high density - High power scenarios*, Journal of Nuclear Materials, 463 (2015), pp. 739 – 743.
- [107] O. Motojima, *The ITER project construction status*, Nuclear Fusion, 55 (2015), pp. 1–20.
- [108] F. Najmabadi, R. W. Conn, and the ARIES Team, *The ARIES-I Tokamak Reactor Study*, Fusion Technology, 19 (1991), pp. 783–790.
- [109] D. Naujoks et al., *Material transport by erosion and redeposition on surface probes in the scrape-off layer of JET*, Nuclear Fusion, 33 (1993), pp. 581–590.
- [110] B. Nold et al., *Generation of blobs and holes in the edge of the ASDEX Upgrade tokamak*, Plasma Phys. Control. Fusion, 52 (2010), pp. 1–12.
- [111] P. Norajitra et al., *Conceptual design of the dual-coolant blanket in the frame of the EU power plant conceptual study*, Fusion Engineering and Design, 69 (2003), pp. 669 – 673.
- [112] J. Ongena et al., *Recent progress toward high performance above the Greenwald density limit in impurity seeded discharges in limiter and divertor tokamaks*, Physics of Plasmas, 8 (2001), pp. 2188–2198.
- [113] B. Pöckl et al., *Comparison of different pellet injection systems for ELM pacing*, Fusion Engineering and Design, 86 (2011), pp. 1022 – 1025.
- [114] P. Pereslavytsev et al., *Neutronic analyses of the HCPB DEMO reactor using a consistent integral approach*, Fusion Engineering and Design, 89 (2014), pp. 1979 – 1983. Proceedings of the 11th International Symposium on Fusion Nuclear Technology-11 (ISFNT-11) Barcelona, Spain, 15-20 September, 2013.
- [115] A. Perujo and K. Forcey, *Tritium permeation barriers for fusion technology*, Fusion Engineering and Design, 28 (1995), pp. 252 – 257.
- [116] R. Pitts et al., *A full tungsten divertor for ITER: Physics issues and design status*, Journal of Nuclear Materials, 438 (2013), pp. 48 – 56.
- [117] B. Povh, K. Rith, C. Scholz, and F. Zetsche, *Teilchen und Kerne*, Springer-Verlag, 7 ed., 2006.
- [118] T. Rauscher et al., *Nucleosynthesis in Massive Stars with Improved Nuclear and Stellar Physics*, The Astrophysical Journal, 576 (2002), pp. 323.
- [119] D. Reiter, *The data file HYDHEL: Atomic and Molecular Data for EIRENE*, August 2002. <http://www.eirene.de/hydhel.pdf> (Aufruf:16.11.2017).
- [120] D. Reiter, *The EIRENE Code User Manual*, November 2009. <http://www.eirene.de/eirene.pdf> (Aufruf: 16.11.2017).

- [121] D. Reiter, *The data file AMJUEL: Additional Atomic and Molecular Data for EIRENE*, August 2015. <http://www.eirene.de/amjuel.pdf> (Aufruf: 16.11.2017).
- [122] D. Reiter, M. Baelmans, and P. Börner, *The EIRENE and B2-EIRENE Codes*, Fusion Science and Technology, 47 (2005), pp. 172–186.
- [123] D. Reiter, G. Wolf, and H. Kever, *Burn condition, helium particle confinement and exhaust efficiency*, Nuclear Fusion, 30 (1990), pp. 2141–2155.
- [124] C. Reux et al., *DEMO reactor design using the new modular system code SYCOMORE*, Nuclear Fusion, 55 (2015), pp. 1–10.
- [125] K.-U. Riemann, *The Bohm criterion and sheath formation*, Journal of Physics D: Applied Physics, 24 (1991), pp. 493.
- [126] K.-U. Riemann, *Kinetic analysis of the collisional plasma-sheath transition*, Journal of Physics D: Applied Physics, 36 (2003), pp. 2811–2820.
- [127] F. Romanelli et al., *Fusion Electricity: A Roadmap to the Realisation of Fusion Energy*. <https://www.euro-fusion.org/wpcms/wp-content/uploads/2013/01/JG12.356-web.pdf> (Aufruf:16.11.2017), November 2012. EFDA.
- [128] M. N. Rosenbluth, W. M. MacDonald, and D. L. Judd, *Fokker-Planck Equation for an Inverse-Square Force*, Phys. Rev., 107 (1957), pp. 1–6.
- [129] G. Rubino et al., *Comparative analysis of the SOL plasma in DEMO using ED-GE2D/EIRENE and TECXY codes*, Nuclear Materials and Energy, 12 (2017), pp. 864–868.
- [130] R. Schneider et al., *Plasma Edge Physics with B2-EIRENE*, Contrib. Plasma Phys., 46 (2006), pp. 3–191.
- [131] V. D. Shafranov, *Plasma Equilibrium in a Magnetic Field*, Reviews of Plasma Physics, 2 (1966), pp. 103.
- [132] I. F. Silvera, *The solid molecular Hydrogens in the condensed Phase: Fundamentals and static Properties*, Rev. Mod. Phys., 52 (1980), pp. 393–452.
- [133] P. Stangeby, *The Plasma Boundary of Magnetic Fusion Devices*, Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia, 2000.
- [134] P. C. Stangeby, *A tutorial on some basic aspects of divertor physics*, Plasma Phys. Control. Fusion, 42 (2000), pp. B271–B291.
- [135] P. C. Stangeby and J. E. Allen, *Plasma boundary as a Mach surface*, Journal of Physics A: General Physics, 3 (1970), pp. 304–308.
- [136] U. Stroth, *Plasmaphysik: Phänomene, Grundlagen, Anwendungen*, Springer-Verlag, 1 ed., 2011.
- [137] E. Sultanov, *Analytische und Polygonale Flächen*. <https://www.hs-augsburg.de/~bauer/konstruktionsmethodik/doc/analytische.polygonale.flaechen.pdf> (Aufruf: 16.11.2017), 2006.

-
- [138] T. Tanabe, *Tritium fuel cycle in ITER and DEMO: Issues in handling large amount of fuel*, Journal of Nuclear Materials, 438 (2013), pp. 19–26.
- [139] T. S. Taylor, *Physics of advanced tokamaks*, Plasma Phys. Control. Fusion, 39 (1997), pp. 47–73.
- [140] M. W. Thompson, *II. The energy spectrum of ejected atoms during the high energy sputtering of gold*, Philosophical Magazine, 18:152 (1968), pp. 377–414.
- [141] M. Z. Tokar, M. Beckers, and W. Biel, *Erosion of installations in ports of a fusion reactor by hot fuel atoms*, Nuclear Materials and Energy, 12 (2017), pp. 1298–1302.
- [142] F. Troyon et al., *MHD-Limits to Plasma Confinement*, Plasma Physics and Controlled Fusion, 26 (1984), pp. 209.
- [143] D. Tskhakaya and M. Groth, *1D kinetic modelling of the JET SOL with tungsten divertor plates*, Journal of Nuclear Materials, 438, Supplement (2013), pp. 522 – 525.
- [144] D. Tskhakaya and M. Groth, *Modelling of tungsten re-deposition coefficient*, Journal of Nuclear Materials, 463 (2015), pp. 624–628.
- [145] L. Vainshtein et al., *Ionization of W atoms and W^+ ions by electrons*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 44 (2011), pp. 1–8.
- [146] G. van Eden et al., *The effect of high-flux H plasma exposure with simultaneous transient heat loads on tungsten surface damage and power handling*, Nuclear Fusion, 54 (2014), pp. 123010.
- [147] H. Vikström, S. Davidsson, and M. Höök, *Lithium availability and future production outlooks*, Applied Energy, 110 (2013), pp. 252–266.
- [148] A. Wallner et al., *Recent near-Earth supernovae probed by global deposition of interstellar radioactive ^{60}Fe* , Nature, 532 (2016), pp. 69–72.
- [149] T. Weber and J. Aktaa, *Numerical assessment of functionally graded tungsten/steel joints for divertor applications*, Fusion Engineering and Design, 86 (2011), pp. 220–226.
- [150] T. Weber et al., *Functionally graded vacuum plasma sprayed and magnetron sputtered tungsten/EUROFER97 interlayers for joints in helium-cooled divertor components*, Journal of Nuclear Materials, 436 (2013), pp. 29–39.
- [151] Webseite. <http://www.kernfragen.de/lexikon/tokamak> (Aufruf: 16.11.2017).
- [152] T. Wegener et al., *Development of yttrium-containing self-passivating tungsten alloys for future fusion power plants*, Nuclear Materials and Energy, 9 (2016), pp. 394 – 398.
- [153] R. Wenninger et al., *DEMO divertor limitations during and in between ELMs*, Nuclear Fusion, 54 (2014), pp. 1–8.
- [154] R. Wenninger et al., *Advances in the physics basis for the European DEMO design*, Nuclear Fusion, 55 (2015), pp. 1–7.
- [155] R. Wenninger et al., *The physics and technology basis entering European system code studies for DEMO*, Nuclear Fusion, 57 (2017), pp. 1–11.

- [156] J. Wesson, *Tokamaks*, Oxford Science Publications, 4th ed., 2011.
- [157] S. Wiesen et al., *The new SOLPS-ITER code package*, Journal of Nuclear Materials, 463 (2015), pp. 480 – 484.
- [158] S. Willms, *Tritium Supply Considerations*. Vortrag im Rahmen des Fusion Development Paths Workshops, http://fire.pppl.gov/fesac_dp_ts_willms.pdf (Aufruf: 16.11.2017), Januar 2003.
- [159] Z. Zhou et al., *High heat loading performance of actively cooled W/Cu FGM-based components*, International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, 18 (2011), pp. 467.
- [160] H. Zohm, *On the minimum size of DEMO*, Fusion Science and Technology, 58 (2010), pp. 613 –624.
- [161] H. Zohm et al., *On the physics guidelines for a tokamak DEMO*, Nuclear Fusion, 53 (2013), pp. 1–6.

Band / Volume 403

**Spatio-Temporal Estimation and Validation of Remotely Sensed
Vegetation and Hydrological Fluxes in the Rur Catchment, Germany**

M. Ali (2018), xvi, 116 pp

ISBN: 978-3-95806-287-0

Band / Volume 404

**Thermomechanical Characterization of Advanced
Ceramic Membrane Materials**

Y. Zou (2018), xvi, 168 pp

ISBN: 978-3-95806-288-7

Band / Volume 405

**Betrachtung der Kristallinitätsentwicklung in mikrokristallinem
Dünnschicht-Silizium mit in-situ Raman-Spektroskopie**

T. Fink (2018), XI, 166 pp

ISBN: 978-3-95806-289-4

Band / Volume 406

**Institute of Energy and Climate Research
IEK-6: Nuclear Waste Management
Report 2015 / 2016**

Material Science for Nuclear Waste Management

S. Neumeier, H. Tietze-Jaensch, D. Bosbach (Eds.)

(2018), 221 pp

ISBN: 978-3-95806-293-1

Band / Volume 407

Reduction properties of a model ceria catalyst at the microscopic scale

J. Hackl (2018), VIII, 98 pp

ISBN: 978-3-95806-294-8

Band / Volume 408

**Comparative Analysis of Infrastructures:
Hydrogen Fueling and Electric Charging of Vehicles**

M. Robinius, J. Linßen, T. Grube, M. Reuß, P. Stenzel, K. Syranidis,

P. Kuckertz and D. Stolten (2018), VII, 108 pp

ISBN: 978-3-95806-295-5

Band / Volume 409

**Reactions between nitrite and soil organic matter and their role in
nitrogen trace gas emissions and nitrogen retention in soil**

J. Wei (2018), XXII, 160 pp

ISBN: 978-3-95806-299-3

Band / Volume 410

**The impact of soil water distribution on root development
and root water uptake of winter wheat**

G. Cai (2018), xviii, 143 pp

ISBN: 978-3-95806-303-7

Band / Volume 411

**Charakterisierung und Optimierung der Grenzfläche Elektrolyt/Kathode
in metallgestützten Festelektrolyt-Brennstoffzellen**

D. Udomsilp (2018), XI, 176 pp

ISBN: 978-3-95806-304-4

Band / Volume 412

**Formation of Secondary Organic Aerosol from Photo-Oxidation
of Benzene: a Chamber Study**

S. H. Schmitt (2018), III, 250 pp

ISBN: 978-3-95806-305-1

Band / Volume 413

**Mechanismen der chrombasierten Degradation
von metallgestützten Festoxid-Brennstoffzellen**

A. Beez (2018), VIII, 144 pp

ISBN: 978-3-95806-306-8

Band / Volume 414

**Entwicklung eines Werkzeugs zur Modellierung der Nettoerosion
im Hauptraum der Brennkammer eines Tokamaks
und Studium der Plasma-Wand-Wechselwirkung an DEMO1**

M. Beckers (2018), XIX, 150 pp

ISBN: 978-3-95806-307-5

Weitere **Schriften des Verlags im Forschungszentrum Jülich** unter
<http://www.zb1.fz-juelich.de/verlagextern1/index.asp>

Energie & Umwelt / Energy & Environment
Band / Volume 414
ISBN 978-3-95806-307-5

Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft

