Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu Wydział Chemii Zakład Spektroskopii Atomowej

Teoretyczne parametry charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego umożliwiające odzwierciedlenie mechanizmu wytwarzania stanów K⁻² oraz będące podstawą diagnostyki plazmy nisko- i wysokotemperaturowej

> dr Katarzyna Słabkowska Autoreferat

> > **Toruń 2016**

Spis treści

1.	Dane osobowe	. 3
2.	Posiadane tytuły i stopnie naukowe	. 3
3.	Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu	. 3
4.	Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopnia	ch
nauko	owych i tytule naukowym oraz o stopniach w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.)	
stano	wiącego podstawę postępowania habilitacyjnego:	.4
4.1.7	Гytuł osiągnięcia naukowego	4
4.2. F	Publikacje składające się na rozprawę habilitacyjną	4
4.3.	Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich	
	wykorzystania	7
4.3	3.1. Cel naukowy badań prowadzonych w ramach rozprawy habilitacyjnej	7
4.3	3.2. Modele teoretyczne zastosowane w przeprowadzonych badaniach	8
4.3	3.3. Szerokość naturalna linii hipersatelitarnej $K^h \alpha_{I,2}$ jako odzwierciedlenie mechanizmu	
	wytwarzania stanów z dwiema dziurami w powłoce K	9
4.	3.4. Propozycja diagnostyki niskotemperaturowej plazmy wykorzystującej parametry linii	
	rentgenowskich ciężkich metali	12
4.3	3.5. Propozycja diagnostyki parametrów wysokotemperaturowej plazmy na podstawie widm	
	rentgenowskich ciężkich metali rejestrowanych w reaktorach termojądrowych typu tokamak	
		20
4.4.	Najważniejsze osiągnięcia badań przeprowadzonych w ramach rozprawy habilitacyjnej	31
4.5.	Plany badawcze	32
4.6.	Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo – badawczych	33
4.0	6.1. Badania wchodzące w skład rozprawy doktorskiej	33
4.0	6.2. Badania niewchodzące w skład rozprawy doktorskiej (opublikowane przed jej złożeniem)
	34	
4.0	6.3. Badania po doktoracie niewchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej	35

1. Dane osobowe

Katarzyna Słabkowska

2. Posiadane tytuły i stopnie naukowe

19.06.2000 - Tytuł magistra chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Chemii, tytuł pracy: **"Teoretyczne badanie widm rentgenowskich serii K dla wielokrotnie zjonizowanych atomów siarki"**,

Promotor: prof. dr hab. Marek Polasik

28.06.2006 - Stopień doktora nauk chemicznych, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Chemii,

tytuł rozprawy doktorskiej: "Teoretyczne badania struktury widm rentgenowskich oraz ich zastosowania do interpretacji widm towarzyszących procesom zderzeniowym ze szczególnym uwzględnieniem widm pochodzących od pocisków",

Promotor: prof. dr hab. Marek Polasik

Recenzenci: prof. dr hab. Jacek Karwowski, prof. dr hab. Jerzy Ciosłowski

3. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu

01.10.2005 - 30.04.2007	Asystent, Pracownia Spektroskopii Atomowej, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
01.05.2007 - 31.09.2010	Asystent, Zakład Spektroskopii Atomowej, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
od 01.10.2010- do teraz	Adiunkt, Zakład Spektroskopii Atomowej, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

4. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.) stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego:

4.1. Tytuł osiągnięcia naukowego

"Teoretyczne parametry charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego umożliwiające odzwierciedlenie mechanizmu wytwarzania stanów K⁻² oraz będące podstawą diagnostyki plazmy nisko- i wysokotemperaturowej"

(osiągnięcie stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego obejmuje cykl 14 publikacji: H1-H14)

4.2. Publikacje składające się na rozprawę habilitacyjną

H1. M. Polasik, <u>K. Słabkowska</u>, K. Kozioł, J. Starosta, J.-Cl. Dousse, J. Hoszowska, and J. Rzadkiewicz, "Lifetimes of doubly K-shell ionized states", Phys. Scr. **T144**, 014021 (2011). **IF** = **1.204**

Mój udział polegał na zaplanowaniu koncepcji i metodologii badań, wykonaniu zdecydowanej większości obliczeń metodą MCDF, dyskusji i interpretacji wyników oraz współredakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 50 %.

H2. M. Polasik, <u>K. Słabkowska</u>, J. Rzadkiewicz, K. Kozioł, J. Starosta, E. Wiatrowska-Kozioł, J.-Cl. Dousse, J. Hoszowska, " $K^h \alpha_{1,2}$ X-ray Hypersatellite Line Broadening as a Signature of *K*-Shell Double Photoionization Followed by Outer-Shell Ionization and Excitation", Phys. Rev. Lett. **107**, 073001-1-5 (2011).

IF = 7.370

Mój udział polegał na zaplanowaniu koncepcji i metodologii badań, w szczególności na zaproponowaniu nowego podejścia teoretycznego uwzględniającego wpływ otwartopowłokowości stanów oraz jonizacji zewnętrznych powłok elektronowych na parametry linii hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$ w celu wyjaśnienia fenomenu nadspodziewanie dużej ich szerokości; wykonaniu zasadniczej części obliczeń metodą MCDF; dyskusji i interpretacji wyników oraz redakcji manuskryptu. Mój wkład oceniam na 40 %.

H3. N.R. Pereira, B.V. Weber, D.G. Phipps, J.W. Schumer, J. F. Seely, J.J. Carroll, J.R. Vanhoy, <u>K. Słabkowska</u>, M. Polasik, "Near-coincident *K*-line and *K*-edge energies as ionization diagnostics for some high atomic number plasmas", Phys. Plasmas **19**, 102705 (2012).

 $\mathbf{IF} = 2.376$

Mój udział polegał na zaplanowaniu koncepcji i metodologii badań teoretycznych (wkład ten był kluczowy dla powstania tej pracy), wykonaniu wszystkich obliczeń metodą MCDF oraz współredakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 50 %.

H4. N.R. Pereira, B.V. Weber, D.G. Phipps, J.W. Schumer, J.F. Seely, J.J. Carroll, J.R. VanHoy, <u>K. Słabkowska</u>, M. Polasik, "10 eV ionization shift in Ir $K\alpha_2$ from a near-coincident Lu *K*-edge", Rev. Sci. Instrum. **83**, 10E110 (2012).

IF = 1.602

Mój udział polegał na zaplanowaniu koncepcji i metodologii badań teoretycznych (wkład ten był kluczowy dla powstania tej pracy), wykonaniu wszystkich obliczeń metodą MCDF oraz współredakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 50 %.

H5. K. Słabkowska*,

"Influence of multiple outer-shell electron stripping on the La, $L\beta$ and Ly x-ray energies of tungsten", Phys. Scr. T156, 014080 (2013).

IF = 1.296

Mój udział polegał na zaplanowaniu koncepcji i metodologii badań, wykonaniu wszystkich obliczeń metodą MCDF, analizie, interpretacji i opracowaniu graficznym otrzymanych wyników oraz redakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 100 %.

H6. J.F. Seely, B.V. Weber, D.G. Phipps, N.R. Pereira, D. Mosher, K. Słabkowska, M. Polasik, J. Starosta, J. Rzadkiewicz, S. Hansen, U. Feldman, L.T. Hudson, J.W. Schumer, "Tungsten L transition line shapes and energy shifts resulting from ionization in warm dense matter", High Energy Density Phys. 9, 354-362 (2013).

IF = 1.519

Mój udział polegał na przygotowaniu koncepcji i metodologii badań, wykonaniu zasadniczej części obliczeń metoda MCDF dla linii rentgenowskich serii L wolframu oraz współredakcji manuskryptu. Mój wkład oceniam na 60 %.

H7. K. Słabkowska*, E. Szymańska, M. Polasik, N.R. Pereira, J. Rzadkiewicz, J.F. Seely, B.V. Weber, J.W. Schumer, "Ionization energy shift of characteristic K x-ray lines from high-Z materials for plasma diagnostics", Phys. Plasmas 21, 031216 (2014).

IF = 2.142

Mój udział polegał na zaplanowaniu szczegółowej metodologii badań, wykonaniu części obliczeń dla linii rentgenowskich serii K ciężkich metali przy użyciu metody MCDF, udziale w interpretacji i współredakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 55 %.

H8. N.R. Pereira, B.V. Weber, D.G. Phipps, J.W. Schumer, J.F. Seely, J.J. Carroll, J.R. VanHoy, K. Słabkowska, M. Polasik, E. Szymańska, J. Rzadkiewicz, "High-resolution (~0.05%) red shift of a ~ 60 keV K β line upon ionization", High Energy Density Phys. 9, 500–504 (2013).

IF = 1.519

Mój udział polegał na zaplanowaniu koncepcji badań, autorstwie modelu teoretycznego, wykonaniu obliczeń metodą MCDF oraz współredakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 60 %.

H9. K. Słabkowska*, E. Szymańska, J. Starosta, M. Polasik, N.R. Pereira, J. Rzadkiewicz, M. Kubkowska, A. Czarnecka, "Diagnostics of plasma based on K, L and M x-ray line positions", Phys. Scr. T161, 014033 (2014),

IF = 1.126

Mój udział polegał na zaplanowaniu koncepcji i metodologii badań, wykonaniu części obliczeń metodą MCDF, udziale w interpretacji i współredakcji manuskryptu. Mój wkład oceniam na 65 %.

H10. K. Słabkowska*, E. Szymańska, Ł. Syrocki, J. Rzadkiewicz, M. Polasik, "The K x-ray line structures for a warm dense copper plasma", High Energy Density Phys. 15, 8-11 (2015).

IF = 1.234

Mój udział polegał na przygotowaniu metodologii badań, udziale w dyskusji i analizie otrzymanych wyników oraz współredakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 65 %.

H11. <u>K. Słabkowska*</u>, E. Szymańska, N.R. Pereira, Ł. Syrocki, J. Rzadkiewicz, M. Polasik, "*K* x-ray line energies as diagnostics of warm dense plasma", High Energy Density Phys. **14**, 30-32 (2015).

IF = 1.234

Mój udział polegał na przygotowaniu ogólnej koncepcji badań, wykonaniu części obliczeń numerycznych, udziale w dyskusji i interpretacji uzyskanych wyników oraz współredakcji manuskryptu.

Mój wkład oceniam na 75 %.

H12. <u>K. Słabkowska</u>*, Ł. Syrocki, E. Szymańska, J. Rzadkiewicz, G. Pestka, M. Polasik, "Modeling of the K and L x-ray line structures for molybdenum ions in warm dense Z-pinch plasma", High Energy Density Phys. **14**, 44-46 (2015).

IF = 1.234

Mój udział polegał na przygotowaniu koncepcji badań, wykonaniu części obliczeń numerycznych, udziale w dyskusji i interpretacji uzyskanych wyników oraz współredakcji manuskryptu. Mój wkład oceniam na 70 %.

H13. <u>K. Słabkowska</u>^{*}, M. Polasik, E. Szymańska, J. Starosta, Ł. Syrocki, J. Rzadkiewicz, N.R. Pereira, "Modeling of the L and M x-ray line structures for tungsten in high-temperature tokamak plasmas", Phys. Scr. T**161**, 014015 (2014).

IF = 1.126

Mój udział polegał na przygotowaniu koncepcji badań, wykonaniu części symulacji pakietem FAC, udziale w dyskusji i interpretacji uzyskanych widm oraz współredakcji manuskryptu. Mój wkład oceniam na 70 %.

H14. <u>K. Słabkowska*</u>, J. Rzadkiewicz, Ł. Syrocki, E. Szymańska, A. Shumack, M. Polasik, N.R. Pereira, and JET contributors, "On the interpretation of high-resolution x-ray spectra from JET with an ITER-like wall", Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **48**, 144028-1-7 (2015).

IF = 1.975

Mój udział polegał na przygotowaniu szczegółowej koncepcji i metodologii badań, wykonaniu części symulacji pakietem FAC, dyskusji i interpretacji uzyskanych wyników oraz redakcji manuskryptu. Mój wkład oceniam na 60 %.

Sumaryczny IF (dla publikacji od H1 do H14) = 26.957

* Autor do korespondencji

4.3. Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich wykorzystania

Energia poszczególnych linii charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego bardzo silnie zależy od ładunku jądra (Z) promieniującego układu, co jest podstawą m.in. rentgenowskiej analizy fluorescencyjnej, wykorzystywanej do identyfikacji pierwiastków w badanych próbkach. Należy jednak podkreślić, że na parametry linii serii *K*, *L* i *M* charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego (takie jak: położenia oraz kształty poszczególnych linii) mają istotny wpływ na takie procesy jak jonizacja wewnętrznych i zewnętrznych powłok, wzbudzenie elektronów, a nawet mechanizm wytwarzania stanów wielodziurowych. Dlatego większość badań dotyczących tych procesów opiera się na precyzyjnej analizie widm charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego, co wiąże się z jego szerokim zastosowaniem w różnych dziedzinach nauki, takich jak spektroskopia atomowa, fizyka jądrowa i fizyka plazmy.

Cykl artykułów [**H1-H14**], będący podstawą niniejszej rozprawy habilitacyjnej obejmuje wyniki moich badań teoretycznych o charakterze podstawowym oraz stanowi punkt wyjścia dla szerokiego zakresu różnorodnych aplikacji, z których część została już z sukcesem zastosowana i również przedstawiona w ramach tego cyklu. Prowadzone w ramach rozprawy badania mają w znacznym stopniu interdyscyplinarny charakter, a do ich realizacji konieczne było zastosowanie bardzo zaawansowanych metod, zarówno teoretycznych jak i eksperymentalnych.

4.3.1. Cel naukowy badań prowadzonych w ramach rozprawy habilitacyjnej

Jednym z bardzo istotnych celów moich badań było poznanie względnej roli mechanizmów powstawania stanów z dwiema dziurami w powłoce *K* atomów oraz natury procesów deekscytacji stanów dziurowych, co stanowi fundament opisu oddziaływania pojedynczego fotonu z elektronami atomu. Wymagało to wykonania systematycznych badań teoretycznych dla wybranych pierwiastków dotyczących czasów życia stanów z dziurami w powłoce *K*, szerokości naturalnych poziomów im odpowiadających oraz szerokości linii hipersatelitarnych serii *K*.

Kolejnym bardzo ważnym celem badań prowadzonych w ramach rozprawy habilitacyjnej była propozycja nowej diagnostyki plazmy niskotemperaturowej, bazująca na wynikach moich przewidywań teoretycznych dla parametrów linii serii K, L i M charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego ciężkich metali. Wiązało się to z opracowaniem specyficznych wariantów metod diagnostyki, uzależnionych od sposobów wytwarzania plazmy oraz od różnych charakterystyk urządzeń służących do rejestracji emitowanych widm rentgenowskich (m.in. zdolności rozdzielczej).

Szczególnie ważnym celem było zaproponowanie nowej diagnostyki dla wysokotemperaturowej plazmy generowanej w reaktorach termojądrowych typu tokamak, której idea polega na dekompozycji rejestrowanych z wysoką zdolnością rozdzielczą widm rentgenowskich serii *M* wolframu oraz serii *L* molibdenu na uzyskane teoretycznie przyczynki, będące wynikiem modelowania tych widm dla określonej temperatury i gęstości elektronowej plazmy w ramach modelu kolizyjnoradiacyjnego (CR - *Collisional-Radiative*) przy użyciu pakietu FAC (*Flexible Atomic Code*). Jak pokazałam [**H14**], zaproponowana diagnostyka umożliwiła mi przeprowadzenie pierwszej wiarygodnej interpretacji widm rentgenowskich zarejestrowanych na tokamaku JET. Można w związku z tym sądzić, że moje wyniki będą kluczowe dla opracowania wysokorozdzielczej diagnostyki rentgenowskiej plazmy w nowych reaktorach termojądrowych (takich jak największy, budowany od 2011 roku, tokamak ITER¹ - *International Thermonuclear Experimental Reactor*).

¹ Od 2016 roku zamiast "International Thermonuclear Experimental Reactor" używa się "The Way" in Latin.

4.3.2. Modele teoretyczne zastosowane w przeprowadzonych badaniach

4.3.2.1. Przewidywanie parametrów charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego

Dla zapewnienia niezwykle dużej dokładności przewidywań teoretycznych parametrów linii serii *K*, *L* i *M* charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego ciężkich metali kluczowe było zastosowanie wielokonfiguracyjnej metody Diraca-Focka (MCDF - *MultiConfiguration Dirac-Fock*) **[H5, H7]** w prowadzonych obliczeniach numerycznych. W metodzie tej efektywny relatywistyczny hamiltonian dla atomu *N*-elektronowego wyrażany jest wzorem:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_{D}(i) + \sum_{j>i=1}^{N} V_{B}(i, j), \qquad (1)$$

gdzie $\hat{h}_D(i)$ jest jednoelektronowym hamiltonianem Diraca dla *i*-tego elektronu. Człon $V_B(i, j)$ opisuje oddziaływanie pomiędzy *i*-tym oraz *j*-tym elektronem, tj. sumę operatora oddziaływania kulombowskiego oraz operatora Breita.

Funkcja falowa dla układu *N*-elektronowego (określana przez liczby kwantowe charakteryzujące wartość kwadratu całkowitego momentu pędu *J*, rzut momentu pędu na wybrany kierunek *M* oraz parzystość *p*) w metodzie MCDF dana jest wzorem [**H5**, **H7**]:

$$\Psi_{s}(JM^{p}) = \sum_{m} c_{m}(s) \Phi(\gamma_{m}JM^{p})$$
(2)

gdzie *s* numeruje poszczególne stany, $\Phi(\gamma_m JM^p)$ są N-elektronowymi funkcjami konfiguracyjnymi stanu (CSF – *Configuration State Functions*), $c_m(s)$ są współczynnikami mieszania konfiguracji dla stanu *s*, zaś γ_m zawiera wszystkie informacje potrzebne do jednoznacznego zdefiniowania danej funkcji stanu. Funkcje $\Phi(\gamma_m JM^p)$ są *N*-elektronowymi funkcjami danymi w postaci wyznacznika Slatera lub kombinacji wyznaczników Slatera zbudowanych z jednoelektronowych spinorów Diraca [**H7**]. Ponadto w obliczeniach konieczne było uwzględnienie nie tylko poprawki Breita do operatora odpychania kulombowskiego, ale również kwantowych poprawek elektrodynamicznych do energii, tzw. poprawek QED, tj. energii własnej i polaryzacji próżni. Istotne było też zastosowanie podczas obliczeń modelu jądra o skończonych rozmiarach, uwzględniającego dwuparametrowy rozkład ładunkowy Fermiego.

4.3.2.2. Modelowanie złożonych struktur widma radiacyjnego emitowanego z plazmy

Modelowanie złożonych struktur widma radiacyjnego dla wysokozjonizowanego wolframu i molibdenu obecnego w plazmie przeprowadzono w ramach modelu CR, za pomocą rozbudowanego pakietu obliczeniowego FAC. W tym pakiecie w pełni relatywistyczna metoda Diraca-Focka-Slatera oraz metoda oddziaływania konfiguracji jest stosowana do obliczeń parametrów struktury atomowej [H12-H14]. W ramach tej metody efektywny hamiltonian relatywistyczny dla *N*-elektronowego atomu ma postać:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} h_D(i) + \sum_{j>i=1}^{N} \frac{1}{r_{ij}},$$
(3)

gdzie $\hat{h}_D(i)$ to jednoelektronowy hamiltonian Diraca. Natomiast człon l/r_{ij} opisuje oddziaływanie kulombowskie pomiędzy *i*-tym oraz *j*-tym elektronem. Podobnie jak w metodzie MCDF funkcja falowa dla układu *N*-elektronowego (określana przez liczby kwantowe charakteryzujące całkowity moment pędu *J*, rzut momentu pędu *M* oraz parzystość *p*) dana jest równaniem (2).

Symulacje przy użyciu pakietu FAC wykonuje się w trzech krokach. Pierwszy z nich polega na wyznaczeniu danych atomowych, takich jak: poziomy energetyczne (EL – energy levels), prawdopodobieństwa przejść radiacyjnych (RT - radiative transition), prawdopodobieństwa przejść naieradiacyjnych Augera (AI - autoionization), przekroje czynne dla wzbudzeń zderzeniowych (CE - collisional excitation), wzbudzeń rezonansowych (RE - resonance excitation), jonizacji zderzeniowej (CI - collisional ionization), fotojonizacji (PI - photoionization) oraz procesów odwrotnych, tj. wychwytu radiacyjnego nazywanego również rekombinacją radiacyjną (RR - radiative recombination) i wychwytu bezradiacyjnego nazywanego także rekombinacją dielektronową (DR - dielectronic recombination). W drugim kroku, dysponując uzyskanymi danymi atomowymi oraz stosując przybliżenia modelu CR, określamy szczegółowe parametry widma rentgenowskiego, emitowanego z plazmy wysokotemperaturowej o danej gęstości. W ostatnim trzecim kroku następuje wygenerowanie zbiorów umożliwiających prezentacje struktur otrzymanego widma radiacyjnego dla badanego przypadku [H12-H14].

4.3.3. Szerokość naturalna linii hipersatelitarnej $K^h \alpha_{1,2}$ jako odzwierciedlenie mechanizmu wytwarzania stanów z dwiema dziurami w powłoce K

Poznanie natury procesów wytwarzania oraz deekscytacji stanów jedno-, dwu- i wielodziurowych stanowi fundament opisu oddziaływania pojedynczego fotonu z elektronami atomu oraz podstawę rentgenowskiej spektroskopii atomowej. W 2009 roku podjęłam się, dla wybranych pierwiastków (o szerokim zakresie liczb atomowych, $10 \le Z \le 102$), teoretycznego zbadania naturalnych szerokości linii hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$ oraz czasów życia stanów z dwiema dziurami w powłoce K. Stwierdziłam [**H1**], że zmniejszanie roli kanału deekscytacji $K^h \alpha_1 (1s^{-2} \rightarrow 1s^{-1}2p_{3/2}^{-1})$ w stosunku do $K^h \alpha_2 (1s^{-2} \rightarrow 1s^{-1}2p_{1/2}^{-1})$, czyli tzw. zamykanie kanału $K^h \alpha_1$, dla lżejszych atomów, nie powoduje efektu dodatkowego zwiększenia czasów życia (a tym samym zmniejszenia szerokości naturalnych) stanów K^{-2} . Ponadto, wykazałam, że czas życia stanów K^{-2} jest nie tylko dwa razy krótszy niż czas życia stanów K^{-1} , ale nawet ponad dwa razy (tj. około 2,1-2,3 razy) krótszy [**H1**]. Przeprowadzone badania zainspirowały mnie do podjęcia dalszych bardziej szczegółowych obliczeń teoretycznych dotyczących szerokości linii hipersatelitarnych, które przedstawiłam poniżej.

Dotychczas wiadomo było [H2], że absorpcja fotonu przez atom może prowadzić do usunięcia obu elektronów z powłoki *K*, tzw. podwójnej fotojonizacji (DPI - *Double Photoionization*) pomimo zaabsorbowania fotonu tylko przez jeden elektron. Proces DPI powłoki *K* może nastąpić na skutek jednego z dwóch mechanizmów [H2]: kwantowego strząsania (SO - 'shakeoff') oraz półklasycznego zderzeniowego (KO - 'knockout'). W procesie SO pierwszy z elektronów (tzw. fotoelektron) w wyniku zaabsorbowania fotonu wyrzucany jest bardzo szybko z powłoki *K* i ze względu na nagłą zmianę potencjału atomowego również drugi elektron z powłoki *K* opuszcza atom (w wyniku procesu strząsania). Natomiast w procesie KO pierwszy elektron z powłoki *K* (po zaabsorbowaniu fotonu) oddziałuje kulombowsko z drugim elektronem z tej powłoki, po czym oba elektrony prawie jednocześnie opuszczają atom.

Usunięcie dwóch elektronów z powłoki K prowadzi do wytworzenia wysokowzbudzonego stanu atomu, który natychmiast ulega deekscytacji czemu towarzyszy emisja linii hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$ w charakterystycznym promieniowaniu rentgenowskim. Stwierdzono, że zarejestrowane w takim przypadku z bardzo wysoką rozdzielczością energetyczną linie hipersatelitarne $K^h \alpha_{1,2}$ dla wybranych pierwiastków ($20 \le Z \le 30$) wyróżniają się nadspodziewanie dużą szerokością [**H2**], co w literaturze światowej nie znalazło do chwili ukazania się artykułu [**H2**] poprawnego teoretycznego wytłumaczenia. Obserwowany "wzrost" szerokości linii $K^h \alpha_{1,2}$ próbowano tłumaczyć drastycznym (niefizycznie dużym) skróceniem czasów życia stanów z dwiema dziurami w powłoce K [np.: R. Diamant et al., Phys. Rev. A **79**, 062511 (2009)]. Co ważniejsze, należy dodać, że nie potrafiono również wcześniej wskazać powiązania pomiędzy szerokością emitowanej linii hipersatelitarnej, a mechanizmem (SO lub KO) wytwarzania stanów z dwiema dziurami w powłoce K.

W celu wyjaśnienia fenomenu nadspodziewanie dużej szerokości linii hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$ zaproponowałam nowe podejście teoretyczne [**H2**] uwzględniające wpływ otwartopowłokowości stanów (OVC – *Open-shell Valence Configuration Effect*) oraz wpływ jonizacji i wzbudzenia zewnętrznych powłok elektronowych (OIE – *Outer-shell Ionization and Excitation Effect*) na szerokość linii [**H2**]. Dla zbadania wpływu efektu OVC na szerokość naturalną linii $K^h \alpha_{1,2}$ atomów otwartopowłokowowych, skonstruowałam dla tych atomów widma teoretyczne: słupkowe (energię przejść oraz ich względne intensywności – czerwone słupki na Rysunku 1) oraz syntetyczne widmo ciągłe (czerwona przerywana linia na Rysunki 1), będące sumą profili Lorentza dla każdego przejścia rentgenowskiego (jako szerokość połówkową profilu Lorentza w połowie wysokości wzięto szerokość naturalną przejścia $K^h \alpha_{1,2}$). Następnie wyznaczono efektywne szerokości obu linii $K^h \alpha_{1,2}$ dla uzyskanego widma syntetycznego, fitując jednym profilem Lorentza linię $K^h \alpha_2$ oraz jednym linię $K^h \alpha_1$ (niebieska linia na Rysunku 1). Jako przykład, na Rysunku 1 przedstawiono szczegóły procedury do wyznaczenia wpływu efektu OVC na efektywną szerokość naturalną linii $K^h \alpha_2$ i $K^h \alpha_1$ dla kobaltu mającego konfigurację walencyjną 3d⁸4s¹) [**H2**].



Rysunek 1. Procedura wyznaczania wpływu efektu OVC na efektywną szerokość naturalną linii $K^h \alpha_{1,2}$ dla otwartopowłokowego atomu Co. Pokazano także profil linii bez efektu OVC – tzn. przy założeniu, że atom Co ma konfigurację zamkniętopowłokową [**H2**].

Natomiast dla atomów zamkniętopowłokowych (np. Ca, Zn) główną przyczyną rozbieżności szerokości wyznaczonych metodą MCDF i doświadczalnych jest zaniedbanie efektu OIE [H2], tj. dodatkowej jonizacji zewnętrznych powłok elektronowych, związanych z procesem strząsania elektronów towarzyszących procesowi kreacji stanu dwudziurowego w powłoce K. Jest tak ponieważ dodatkowa jonizacja powoduje domieszkę stanów otwartopowłokowych, a w konsekwencji opisane wyżej poszerzenie linii. Także dla atomów otwartopowłokowych jonizacja powłok walencyjnych powoduje dodatkowe poszerzenie linii.



Rysunek 2. Procedura określenia wpływu efektu OIE na szerokość linii hipersatelitarnej $K^h \alpha_{1,2}$ w przypadku scenariusza OIE2 na przykładzie atomu Ca [**H2**].

Na Rysunku 2 zaprezentowano zastosowanie procedury określenia wpływu efektu OIE na szerokość linii hipersatelitarnej w przypadku scenariusza OIE2 (fast KO) na przykładzie zamkniętopowłokowego atomu Ca. Jak można zauważyć z Rysunku 2, wkład przyczynków satelitarnych do linii hipersatelitarnej $K^h \alpha_{1,2}$ (które to są nieco przesunięte w stosunku do "czystej" linii hipersatelitarnej i zazwyczaj szersze) powoduje wzrost szerokości efektywnej linii hipersatelitarnej $K^h \alpha_{1,2}$. Należy podkreślić, że w artykule [**H2**] w celu powiązania mechanizmu (SO lub KO) wytwarzania stanów z dwiema dziurami w powłoce K z nadspodziewanie dużymi eksperymentalnymi szerokościami linii hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$ zaproponowałam rozważenie trzech teoretycznych scenariuszy produkcji stanów wielodziurowych w atomach, których deekscytacja prowadzi do ich rejestracji (Tabela 1):

- największy efekt OIE powinien występować jako następstwo "silnego" strząsania elektronów w przypadku nagłej zmiany potencjału wywołanej szybkim i jednoczesnym wyrzuceniem obu elektronów z powłoki K – scenariusz nazwany OIE2 (fast KO);
- 2. słabszy efekt OIE powinien występować jako następstwo strząsania elektronów w przypadku nagłej zmiany potencjału wywołanej szybkim wyrzuceniem jednego elektronu z powłoki K scenariusz nazwany OIE1 (SO);
- 3. efekt OIE nie powinien być obserwowany, gdy kreacja dziury w powłoce *K* jest na tyle wolna, iż nie wywołuje żadnego procesu strząsania slow KO (uwzględnienie wyłącznie efektu OVC).

Tabela 1. Teoretyczne przewidywania szerokości naturalnej linii $K^h \alpha_2$ i $K^h \alpha_1$, otrzymane przy użyciu różnych modeli, w porównaniu do istniejących danych eksperymentalnych dla wybranych atomów $20 \le Z \le 30$ [H2].

	Confi-	Width of	Natural linewidths (eV)									Lifetime of	
Atom	i gura- tion	gura- K^{-2} state tion (eV)	Eq. (1)	OVC ^a	$K^h \alpha_2$ OIE1 ^b	OIE2 ^c	Exp.	Eq. (1)	OVC ^a	$K^h \alpha_1$ OIE1 ^b	OIE2 ^c	Exp.	K^{-2} state (10 ⁻¹⁶ s)
$_{20}$ Ca	$(4s^2)$	1.87	2.85	2.85	2.99	3.63	$3.72(18)^{d}$	2.85					3.52
²⁰ ₂₃ V	$(3d^44s^1)$	2.24	3.53	5.20	5.28	5.46	$5.5(1)^{e}$ $5.54(19)^{d}$	3.53	5.35	5.47	5.66	$6.0(6)^{e}$ $5.6(10)^{d}$	2.94
$_{24}$ Cr	$(3d^54s^1)$	2.39	3.73	5.41	5.59	5.77	5.7(1) e	3.73	6.60	6.72	6.90	5.0(9) ^e	2.75
$_{27}^{27}$ Co	$(3d^84s^1)$	2.96	4.66	5.82	6.17	6.80	6.7(1) ^e	4.67	6.19	6.52	6.94	7.1(6) ^e	2.24
$_{30}$ Zn	$(3d^{10}4s^2)$	3.69	5.92	5.92	6.49	7.23	7.5(4) ^e	5.93	5.93	6.06	6.59	6.4(7) ^e	1.78

^aEfektywne szerokości linii obejmujące tylko efekt OVC. ^bEfektywne szerokości linii z poszerzeniami OIE1 i OVC. ^cEfektywne szerokości linii z poszerzeniami OIE2 i OVC. Wzór Eq.(1) oraz odnośniki d i e można znaleźć w pracy [**H2**].

Moje teoretyczne przewidywania szerokości naturalnych linii $K^h \alpha_2$ i $K^h \alpha_1$ dla różnych modeli teoretycznych, opisanych w artykule [**H2**], w porównaniu do istniejących danych eksperymentalnych dla fotoindukowanych widm hipersatelitarnych serii *K* wybranych atomów przedstawiono w Tabeli 1. Jak można zauważyć – w każdym z badanych przypadków eksperymentalna szerokość linii rentgenowskich $K^h \alpha_2$ i $K^h \alpha_1$ (Exp.) jest dużo większa od teoretycznie wyznaczonej bazowej szerokości naturalnej przejścia $K^h \alpha_{1,2}$ (kolumna druga w Tabeli 1). Jak można zauważyć z Tabeli 1, uwzględnienie wyłącznie efektu OVC (slow KO) znacznie zmniejsza różnice pomiędzy wartościami teoretycznymi (efektywną szerokość linii uwzględniającą tylko poszerzenie pochodzące od efektu OVC oznaczono w Tabeli 1) i eksperymentalnymi szerokościami linii hipersatelitarnej tylko w przypadku atomów otwartopowłokowych takich jak V, Cr i Co.

Wyniki przedstawionych badań nad czasami życia stanów K^{-2} oraz szerokościami linii hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$ pozwoliły nie tylko na wyjaśnienie fenomenu poszerzenia linii hipersatelitarnych [**H2**], lecz także dostarczyły nowatorskiego podejścia do analizy teoretycznej wysokorozdzielczych, fotoindukowanych widm rentgenowskich, pozwalającego na uzyskanie wiarygodnych informacji o względnej roli mechanizmów wytwarzania stanów K^{-2} poprzez analizę szerokości naturalnych linii hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$. Po raz pierwszy pokazałam [**H2**], że aby uzyskać dobrą zgodność z danymi doświadczalnymi dotyczącymi szerokości linii hipersatelitarnych należy uwzględnić wpływ otwartopowłokowości konfiguracji walencyjnych rozpatrywanych atomów (OVC) oraz wpływ jonizacji i wzbudzenia zewnętrznych powłok elektronowych (OIE, w wyniku procesów typu shake-off i shake-up powstających w następstwie nagłego aktu kreacji dziur w powłoce *K*) na szerokość linii. Ponieważ szerokość linii hipersatelitarnej zależy istotnie od wielkości efektu OIE, natomiast wielkość efektu OIE zależy od mechanizmu powstawania stanów K^{-2} , więc analiza szerokości linii $K^h \alpha_{1,2}$ jest dobrym narzędziem do wnioskowania o mechanizmie powstawania stanów dwudziurowych w powłoce *K*.

Szczegółowa analiza teoretyczna zarejestrowanych fotoindukowanych widm hipersatelitarnych $K^h \alpha_{1,2}$ dla wybranych pierwiastków o liczbie atomowej od 20 do 30 wykazała [**H2**], że w badanych przypadkach mechanizm "szybkiego KO" (*'fast knockout'*) odgrywa dominującą rolę w wytwarzaniu stanów K^{-2} . Należy podkreślić, że wyniki moich badań pozwalają lepiej poznać naturę oddziaływania fotonu z elektronami atomu oraz procesy następujące po nim. Mają one także ważne konsekwencje dla podstaw spektroskopii atomowej i oznaczają konieczność weryfikacji baz danych dotyczących wartości niektórych parametrów atomowych (m.in. szerokości naturalnych dla stanów dziurowych).

4.3.4. Propozycja diagnostyki niskotemperaturowej plazmy wykorzystującej parametry linii rentgenowskich ciężkich metali

Moja propozycja diagnostyki niskotemperaturowej gęstej plazmy bazuie na idei wykorzystania szczegółowych przewidywań teoretycznych dotyczących parametrów linii rentgenowskich serii K, L i M cieżkich metali. Należy jednak podkreślić, że do 2011 roku w literaturze naukowej nie było dostępnych wyników systematycznych badań dotyczących wpływu zrywania elektronów z zewnętrznych powłok na struktury linii rentgenowskich, które byłyby rezultatem precyzyjnych obliczeń teoretycznych. W związku z powyższym realizacja tej idei wymagała przeprowadzenia w pierwszym etapie szczegółowych obliczeń numerycznych dotyczacych wpływu zrywania elektronów z zewnętrznych powłok na strukturę linii rentgenowskich serii K, L i M pochodzacych od cieżkich metali. Konieczna w następnym etapie była analiza otrzymanych wyników pod kątem przydatności otrzymanych zależności dla wybranych linii rentgenowskich, w celu opracowania szczegółowych wariantów proponowanej metody diagnostyki niskotemperaturowej plazmy w zależności od specyficznych sposobów jej wytwarzania oraz różnych charakterystyk (takich jak zdolność rozdzielcza) urządzeń służących do rejestracji emitowanych widm rentgenowskich. Należy podkreślić, że już pierwsza próba zastosowania mojej propozycji diagnostyki parametrów niskotemperaturowej gęstej plazmy wytworzonej z ciężkich metali zakończyła się wielkim sukcesem. Okazało się, że interpretacja parametrów zarejestrowanych widm w oparciu o wyznaczone przesunięcia linii rentgenowskich serii K w wyniku jonizacji umożliwiły określenie m. in. stopnia jonizacji irydu w stanie plazmy wytwarzanej w wyniku wyładowań impulsowych, na urządzeniu Gamble II w Naval Research Laboratory (NRL) w Waszyngtonie, przy użyciu diody Plasma-Filled Rod-Pinch (PFRP) [H3, H4].

4.3.4.1. Przesunięcia energetyczne linii rentgenowskich serii *L* wolframu w wyniku zrywania elektronów z zewnętrznych powłok

Na Rysunku 3 przedstawiłam przesunięcia energetyczne otrzymane dla różnych linii rentgenowskich serii *L* wolframu tj. $L\alpha_1$, $L\beta_1$, $L\beta_2$, $L\beta_3$, $L\beta_4$, $L\gamma_1$, $L\gamma_2$ i $L\gamma_3$ w funkcji zrywania elektronów z zewnętrznych powłok (tj. gdy elektrony są usuwane z jonów w kolejności ich rosnącej energii wiązania). Warto nadmienić, że przesunięcia energetyczne zostały obliczone w odniesieniu do energii odpowiednich linii diagramowych, otrzymanych dla konfiguracji elektronowej stanu podstawowego [Xe] 4f¹⁴ 5d⁴ 6s² wolframu [**H5**].



Rysunek 3. Przesunięcia energetyczne linii rentgenowskich $L\alpha_1$ ($3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$), $L\beta_1$ ($3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$), $L\beta_2$ ($4d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$), $L\beta_3$ ($3p_{3/2} \rightarrow 2s$), $L\beta_4$ ($3p_{1/2} \rightarrow 2s$), $L\gamma_1$ ($4d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$), $L\gamma_2$ ($4p_{1/2} \rightarrow 2s$) i $L\gamma_3$ ($4p_{3/2} \rightarrow 2s$) wolframu (względem linii diagramowych) w funkcji liczby zrywanych elektronów z zewnętrznych powłok [**H5**].

Jak można zauważyć na Rysunku 3 zrywanie elektronów walencyjnych z powłok 6s i 5d nie wpływa na przejścia wewnątrzpowłokowe badanych linii $L\alpha_1$ i $L\beta_1$ zatem przesunięcia energetyczne tych linii są nieistotne dla niskich stopni jonizacji zewnętrznych powłok, aż do $q \sim 6$. Powyżej tego stopnia jonizacji (q > 6) linie $L\alpha_1$ i $L\beta_1$ ulegają przesunięciu w kierunku wyższej energii osiągając miejscowe maximum (~ 7 eV) dla stopnia jonizacji q=14. Obserwowany efekt to tzw. *blue shift*. Dalsza jonizacja wolframu wpływa na redukcję energii linii $L\alpha_1$ i $L\beta_1$. Zrywanie elektronów powłok 4d (dla q > 28), 4p i 4s powoduje gwałtowny wzrost energii linii $L\alpha_1$ i $L\beta_1$, osiągając wartość przesunięcia 120 eV dla największego stopnia jonizacji q=46. Linie te ulegają wyraźnemu przesunięciu w kierunku wyższej energii dopiero przy jonizacji przekraczającej 30 elektronów usuniętych z zewnętrznych powłok. Na podstawie przeprowadzonej przeze mnie analizy można zauważyć, ze najmniej wrażliwe na niewielką jonizację są najsilniejsze linie $L\alpha_1$ i $L\beta_1$ [**H5**].

Podobnie jak najsilniejsze linie $L\alpha_1$ i $L\beta_1$ zachowują się linie $L\beta_3$ i $L\beta_4$. Dla niskiego stanu jonizacyjnego zależność pomiędzy przesunięciami energetycznymi linii $L\beta_3$ i $L\beta_4$ a stopniami jonizacji jonów wolframu jest bardzo podobna jak obserwowano dla linii $L\alpha_1$ i $L\beta_1$. Dla wyższych stopni jonizacji (q > 30) energia linii $L\beta_3$ i $L\beta_4$ zaczyna silnie rosnąć, zaś powyżej stopnia jonizacji q > 46 rośnie bardzo gwałtownie, osiągając wartość przesunięcia 550 eV (dla stopnia jonizacji q=56). Zdecydowanie bardziej wrażliwe na jonizację (w porównaniu do poprzednich linii) są linie $L\gamma_2$, $L\gamma_3$, $L\beta_2$ oraz $L\gamma_1$. Począwszy od obojętnego atomu, wraz z zwiększaniem stopnia jonizacji, energia linii $L\gamma_3$ i $L\gamma_2$ rośnie monotonicznie. Ta monotoniczna zależność staje się coraz bardziej widoczna już po usunięciu 15 elektronów z atomu, osiągając maksymalną wartość przesunięcia 300 eV dla stopnia jonizacji q=38. W przypadku linii $L\beta_2$ i $L\gamma_1$ usunięcie już kilku elektronów z zewnętrznych powłok powoduje gwałtowny wzrost energii linii $L\beta_2$ i $L\gamma_1$, osiągając wartość przesunięcia 120 eV dla stopnia jonizacji q=28 [H5].

Wyniki moich badań wskazują, że wybór optymalnego wariantu zaproponowanej metody diagnostyki plazmy, na podstawie linii serii L ciężkich metali, powinien uwzględniać bardzo różną intensywność poszczególnych linii serii L oraz różną ich wrażliwość na usuwanie elektronów

z zewnętrznych powłok. Szczegółowa analiza zależności przedstawionych na Rysunku 3 pokazała, że poszczególne linie rentgenowskie serii L odznaczają się na ogół istotnie różną wrażliwością na jonizację zewnętrznych powłok. Warto podkreślić, że linie $L\beta_2$ są liniami stosunkowo silnymi i są najbardziej wrażliwe spośród badanych linii na usuwanie elektronów z zewnętrznych powłok (wyraźnie przesuwają się w kierunku wyższych energii w przypadku usunięcia 15 elektronów z zewnętrznych powłok) [**H5**].

Wykazałam [H5], że precyzyjna ocena zakresu możliwości zastosowania diagnostyki opartej o linie serii *L* ciężkich pierwiastków powinna uwzględniać bardzo różną wrażliwość poszczególnych linii serii *L* na usuwanie elektronów z zewnętrznych powłok. Należy dodać, że linie $L\beta_2$ mogą być zastosowane do diagnostyki parametrów plazmy o niskiej temperaturze (tj. przy niewielkiej jonizacji), natomiast linie $L\alpha_1$, $L\beta_1$, $L\beta_3$ i $L\beta_4$ w przypadku plazmy o wyższej temperaturze, tj. plazmy wytwarzanej przy użyciu laserów takich jak np. PHELIX w GSI (Niemcy) lub LULI (Francja). Uzyskane przeze mnie precyzyjne informacje o przesunięciach energetycznych poszczególnych linii rentgenowskich wolframu w wyniku jonizacji powłok elektronowych mogą być również niezwykle cenne przy opracowywaniu nowych diagnostyk plazmy w reaktorach termojądrowych typu tokamak (takich jak JET - *Joint European Torus*, WEST - *Tungsten (W) Environment in Steady-state Tokamak*, a także ITER) [H5].

4.3.4.2.Wyznaczenie rozkładów ładunkowych jonów wolframu dla gęstej niskotemperaturowej plazmy wyłącznie na podstawie szczegółowej analizy teoretycznej linii rentgenowskich serii L

Zrealizowanie przeze mnie systematycznych badań teoretycznych dla różnych linii rentgenowskich serii L wolframu, których wyniki przedstawiono powyżej, zbiegło się z propozycją współpracy, z jaką zwróciła się do mnie grupa eksperymentatorów prof. Seely'ego z USA. Umożliwiło mi to niemal natychmiast zastosowanie zaproponowanej przeze mnie nowatorskiej wiarygodnej interpretacji do zarejestrowanych z niezwykle dużą zdolnością rozdzielczą (tj. z dokładnością $\pm 2 \ eV$) struktur kilku linii rentgenowskich serii L emitowanych z gęstej niskotemperaturowej plazmy (tzw. *warm dense pasmas*) wolframowej wytworzonej przy użyciu diody PFRP na urządzeniu *Gamble II* w NRL [**H6**].



Rysunek 4. Dopasowanie profili Lorentza dla czterech najsilniejszych linii $L\beta$ [**H6**].

Na Rysunku 4 przedstawiono zarejestrowane widmo rentgenowskie wolframu obejmujące cztery najsilniejsze linie typu $L\beta$, których położenia wyznaczono poprzez dopasowanie profili Lorentza przy użyciu metody najmniejszych kwadratów. Jak można zauważyć na Rysunku 4, tylko linia $L\beta_2$ jest przesunięta w kierunku wyższych energii w stosunku do linii diagramowej (patrz

pionowe linie dla linii diagramowych $L\beta_4$, $L\beta_1$, $L\beta_3$ i $L\beta_2$). Oznacza to, że linia $L\beta_2$ wykazuje wyraźnie większą wrażliwość na jonizację zewnętrznych powłok niż linie $L\beta_1$, $L\beta_3$ i $L\beta_4$, co wcześniej zostało przeze mnie stwierdzone na podstawie przewidywań teoretycznych [**H5**].

Aby umożliwić szczegółową interpretację zarejestrowanego widma rentgenowskiego wolframu (poprzez dekompozycję na przyczynki teoretyczne), kluczowa linia $L\beta_2$ stanowiąca część widma przedstawionego na Rysunku 4 została pokazana bardziej szczegółowo jako punkty danych na Rysunku 5. Poszczególne przyczynki teoretyczne reprezentują przejścia typu $2p_{3/2} \rightarrow 4d_{5/2}$ dla jonów wolframu o określonych stopniach jonizacji (aż do stopnia jonizacji +28). Dwie pionowe linie odwzorowują energie przejścia: (a) w niezjonizowanym dodatkowo wolframie (tj. dla linii diagramowej $L\beta_2$), (b) w jonie wolframu o stopniu jonizacji q=28 [**H6**].

Każdy przyczynek teoretyczny reprezentuje funkcję Lorentza (o tej samej szerokości), przesuniętą w kierunku wyższych energii w stosunku do linii diagramowej $L\beta_2$. Suma poszczególnych przyczynków teoretycznych została dopasowana do punktów eksperymentalnych, a wartości udziałów poszczególnych przyczynków po normalizacji do jedności stanowią ułamkowe rozkłady ładunkowe jonów wolframu w stanie plazmy. Przyczynki teoretyczne przedstawione na Rysunku 5 wskazują na to, że jony wolframu dla jonizacji poniżej q=10 nie wnoszą znaczącego wkładu do zarejestrowanej linii $L\beta_2$. Największy wkład mają jony wolframu dla q=17, natomiast w pobliżu q=28 mają małe, ale zauważalne wkłady w wysokoenergetycznym obszarze linii $L\beta_2$ [**H6**].



Rysunek 5. Dane eksperymentalne dotyczące linii rentgenowskiej $L\beta_2$ i krzywe reprezentujące przejścia typu $2p_{3/2} \rightarrow 4d_{5/2}$ w określonych stanach jonizacyjnych wolframu [**H6**].

Warto pokreślić, że moim bardzo ważnym osiągnięciem było zaproponowanie nowego podejścia umożliwiającego dokonanie, po raz pierwszy, rozkładu ładunkowego jonów wolframu poprzez dekompozycję zarejestrowanej z wysoką zdolnością rozdzielczą linii rentgenowskiej $L\beta_2$ dla wolframu na przyczynki teoretyczne odpowiadające poszczególnym jego stopniom jonizacji w stanie plazmy (Rysunek 5). Ponadto, rozkład ten uzyskano bez wykorzystania dodatkowych modeli teoretycznych (tj. hydrodynamicznych, kinetycznych). Okazało się, że struktury linii rentgenowskich serii L wolframu mogą być czułym narzędziem do diagnostyki parametrów plazmy i pozwoliły na nowatorską interpretację widm eksperymentalnych [**H6**].

4.3.4.3. Diagnostyka parametrów niskotemperaturowej plazmy na podstawie zmiany parametrów linii rentgenowskich serii *K* ciężkich metali

Powyżej przestawione w punkcie 4.3.4.2. bardzo obiecujące wyniki zastosowania mojej propozycji diagnostyki parametrów niskotemperaturowej gęstej plazmy wytworzonej z ciężkich metali (dla serii *L* wolframu) zainspirowały mnie do przeprowadzenia szeroko zakrojonych badań nad liniami rentgenowskimi serii *K* dla kilku metali ciężkich. Dlatego, podjęłam przeprowadzenie teoretycznych przewidywań dotyczących wpływu zrywania elektronów z zewnętrznych powłok na położenia linii $K\alpha_{1,2}$, $K\beta_{1,3}$ i $K\beta_2$ dla metali ciężkich, takich jak: dysproz (Dy, Z=66), iterb (Yb,

Z=70), wolfram (W, Z=74) i iryd (Ir, Z=77) [**H7**]. Rysunki 6-7 przedstawiają przesunięcia energetyczne otrzymane systematycznie dla wybranych linii rentgenowskich serii K metali ciężkich otrzymane przy użyciu metody MCDF.

Na Rysunku 6 przedstawiono przesunięcia energetyczne otrzymane dla linii $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$ w funkcji obdzierania elektronów, dla poszczególnych zewnętrznych podpowłok Dy, Yb, W i Ir (tj. gdy elektrony są usuwane z jonów w kolejności ich rosnącej energii wiązania). Przesunięcia energetyczne linii rentgenowskich $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$ tych czterech metali zostały wyznaczone względem linii diagramowych. Jak można zauważyć na Rysunku 6 metale Dy i Yb wykazują bardzo podobną zależność przesunięć energetycznych w funkcji obdzierania elektronów zewnętrznych powłok. Usunięcie elektronów z powłoki 6s nie wpływa istotnie na energię linii $K\alpha_{1,2}$. Dopiero zrywanie elektronów z powłoki 4f powoduję redukcję energii linii $K\alpha_{1,2}$ (minimum lokalne dla dysprozu ~ -12 eV pojawia się przy stopniu jonizacji q = 12, zaś dla iterbu obserwujemy minimum lokalne ~ -18 eV dla stopnia jonizacji q=16) i obserwujemy negatywny efekt tzw. red shift. Dla stopni jonizacji pomiędzy q=12 i q=30 (gdy usuwane są elektrony z powłok 5p, 5s i 4d) można zauważyć że energia linii $K\alpha_{1,2}$ zaczyna powoli wzrastać, zaś jej silniejszy wzrost obserwowany jest dla wyższych stopni jonizacji (od q=30 do q=48, gdy zrywane są elektrony z powłok 4p, 4s i 3d). Zrywanie zewnętrznych elektronów z kolejnych powłok (3d i 3s) powoduję już bardzo gwałtowny wzrost energii linii $K\alpha_{1,2}$ Dy i Yb. Inną zależność przesunięć energetycznych w funkcji obdzierania elektronów zewnętrznych powłok można zauważyć dla dwóch pozostałych metali: Ir i W [H7].



Rysunek 6. Przesunięcia energetyczne linii rentgenowskich $K\alpha_1$ (oznaczone jako linie ciągłe) i $K\alpha_2$ (oznaczone jako linie przerywane) dysprozu, iterbu, irydu i wolframu w funkcji liczby zrywanych elektronów z zewnętrznych powłok [**H7**].

Dla irydu w stanie plazmy zależność przesunięć energetycznych w funkcji zrywania elektronów z zewnętrznych powłok została omówiona w artykule [**H7**]. Zrywanie elektronów walencyjnych 5d i 6s nie wpływa zauważalnie na linie $K\alpha_{1,2}$. Powyżej stopnia jonizacji q > 10, kiedy naruszona zostaje podpowłoka 4f, linie $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$ ulegają przesunięciu w kierunku wyższej energii, z miejscowym maksimum (~ 7-8 eV) dla stopnia jonizacji q = 17. Wyższa jonizacja irydu (17 < q < 31) wpływa na redukcję energii linii $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$, tzw. *red shift*. Natomiast zerwanie elektronów podpowłoki 4p (dla q > 40) powoduje gwałtowny wzrost energii linii $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$, aż do kilkudziesięciu eV.

Zależność przesunięć energetycznych linii $K\alpha_{1,2}$ wolframu w funkcji zrywania elektronów z zewnętrznych powłok jest jakościowo zbliżona do zależności obserwowanej dla linii $K\alpha_{1,2}$ irydu. Również obserwujemy dla tego metalu efekt *blue shift*, z miejscowym maksimum dla stopnia jonizacji q = 14. Dla wyższych stopni jonizacji (q > 18) następuje wyraźny wzrost przesunięcia energetycznego linii $K\alpha$ wraz ze stopniem jonizacji. Natomiast powyżej stopnia jonizacji (q > 38) wzrost ten jest drastyczny. Krzywa, która reprezentuje przesunięcia energetyczne danej linii rentgenowskiej serii K, zanika, gdy wszystkie elektrony biorące udział w danym przejściu zostaną usunięte (tj. gdy dana linia rentgenowska serii K przestaje istnieć).



Rysunek 7. Przesunięcia energetyczne linii rentgenowskich $K\beta_{1,3}$ dysprozu, iterbu, irydu i wolframu w funkcji liczby zrywanych elektronów z zewnętrznych powłok [**H7**].

Natomiast w przypadku wolframu zależność przesunięć energetycznych w funkcji zrywania elektronów z zewnętrznych powłok została bardziej szczegółowo przedstawiona w podrozdziale 4.3.4.4. W obrębie moich badań nad wpływem obdzierania elektronów zewnętrznych podpowłok na położenia linii serii K metali ciężkich podjęłam także wyznaczenie przesunięć energetycznych dla linii rentgenowskich $K\beta_{1,3}$ i $K\beta_2$ tych metali [H7]. Rysunek 7 przedstawia przesunięcia energetyczne otrzymane dla linii $K\beta_{1,3}$ w funkcji obdzierania elektronów, dla poszczególnych zewnętrznych podpowłok Dy, Yb, W i Ir. Dla niskiego stanu jonizacyjnego zależność pomiędzy przesunięciami energetycznymi linii $K\beta_{1,3}$, a stopniami jonizacji dysprozu, iterbu, wolframu i irydu jest bardzo podobna jak dla linii $K\alpha_{1,2}$. Jak można zauważyć na Rysunku 7 linie $K\beta_{1,3}$ są bardziej wrażliwe na zrywanie elektronów z zewnętrznych powłok niż linii $K\alpha_{1,2}$. Przesunięcia energetyczne otrzymane dla linii Kβ₂ w funkcji obdzierania elektronów, dla poszczególnych zewnętrznych podpowłok Dy, Yb, W i Ir przedstawiłam również w pracy [H7]. Rozdzielenie linii $K\beta_2^I$ od linii $K\beta_2^{II}$ jest bardzo trudne, ponieważ wiele uwzględnionych w obliczeniach przejść posiada niemal taką samą energię. Stwierdziłam, że linie $K\beta_2$ są najbardziej wrażliwe na jonizację spośród badanych linii. Dla badanych metali ciężkich usunięcie już kilku elektronów z atomu powoduje, że energia linii $K\beta_2$ zaczyna rosnąć monotonicznie wraz ze zwiększaniem q.

Otrzymane wyniki dla linii rentgenowskich $K\beta_{I,3}$ iterbu zostały zaprezentowane szczegółowo w artykule [**H8**]. Ponadto, w tej pracy dokonano pierwszej wiarygodnej interpretacji niewyjaśnionego wcześniej tajemniczego zachowania się linii $K\beta_{I,3}$ iterbu w wyniku jonizacji zewnętrznych powłok. Teoretyczne przewidywania dla tej linii potwierdziły, że przesunięcia energetyczne dla linii $K\beta_{I,3}$ iterbu są ujemne i są zgodne z pomiarami eksperymentalnymi PFRP [**H8**].

Zaproponowana przeze mnie metoda precyzyjnej analizy przesunięć energetycznych poszczególnych linii rentgenowskich metali ciężkich w wyniku zrywania elektronów z zewnętrznych powłok ma duże znaczenie aplikacyjne, gdyż stwarza nowe możliwości wiarygodnej interpretacji różnorodnych, w szczególności bardzo złożonych widm rentgenowskich. Są one niezwykle cennym narzędziem w diagnostyce niskotemperaturowej plazmy wytwarzanej różnymi sposobami: w wyniku wyładowań impulsowych (np. przy użyciu diody PRFP), przy zastosowaniu laserów (m.in. na urządzeniu NIF, które wywołuje kontrolowaną syntezę termojądrową za pomocą silnego impulsu laserowego) oraz w najpotężniejszym na świecie akceleratorze impulsowym tzw. *maszynie "Z"*. Należy podkreślić, że część przedstawionych powyżej wyników została już wykorzystana do wyznaczenia parametrów plazmy, m.in. stopnia jonizacji irydu [**H7**] i iterbu [**H8**] oraz ich temperatury elektronowej.

4.3.4.4. Diagnostyka parametrów plazmy wytwarzanej różnymi sposobami na podstawie zmiany parametrów linii serii *K*, *L* i *M* wolframu

W związku z wyjątkową rolą wolframu wykorzystywanego do diagnostyki plazmy wytwarzanej różnymi sposobami podjęłam przeprowadzenie systematycznych badań [**H9**] dotyczących wpływu zrywania elektronów (w kolejności ich rosnącej energii wiązania) na przesunięcia energetyczne wszystkich linii rentgenowskich serii *K*, *L* i *M* tego pierwiastka. Wartości przesunięć energetycznych zostały wyznaczone w odniesieniu do odpowiednich energii linii diagramowych, otrzymanych dla konfiguracji elektronowej stanu podstawowego wolframu [Xe] 4f¹⁴ 5d⁴ 6s². Warto podkreślić, że do tej pory nie przeprowadzono tak szczegółowych badań dla jakiegokolwiek pierwiastka.

W artykule [H9 na Rysunku 2] przedstawiono przesunięcia energetyczne wszystkich badanych linii rentgenowskich serii K wolframu w funkcji liczby zrywanych elektronów z zewnętrznych powłok. Niektóre z tych linii zostały już szczegółowo omówione w Rozdziale 4.3.4.3. Ponadto w tym artykule przedstawiono na Rysunku 4 wyniki badań, które nawiązują do moich wcześniejszych badań nad liniami serii L, które zostały przedstawione w Rozdziale 4.3.4.1. [H5]. Warto zwrócić uwagę, że w artykule [H9] zestawiono na jednym wykresie wyniki wszystkich linii rentgenowskich serii L wolframu w istotnie większym zakresie jonizacji zewnętrznych powłok (tj. aż do q = 64).



Rysunek 8. Przesunięcia energetyczne dla linii rentgenowskich serii *M* wolframu w funkcji jonizacji zewnętrznych powłok [H9].

Rysunek 8 przedstawia wyniki badań [**H9**] dotyczące wpływu zrywania elektronów na przesunięcia energetyczne różnych linii rentgenowskich serii M wolframu. Dla linii rentgenowskich serii M wolframu przesuniecia energetyczne są znaczące już dla niskich stopni jonizacji zewnetrznych powłok i są bardzo duże w stosunku do energii samych linii diagramowych. Jest to szczególnie obiecujące w przypadku najsilniejszej linii $M\alpha_1$ (M_5N_7), dla której wartość energii linii diagramowej wynosi 1775.4 eV. Dla takich wartości energii zdolność rozdzielcza spektrometrów krystalicznych jest wystarczajaco wysoka, aby zarejestrować przesunięcia energetyczne poszczególnych oddzielonych linii, odpowiadajacych różnym stopniom jonizacji zewnetrznych powłok.

Warto podkreślić, że powyższa analiza dała możliwość zaproponowania diagnostyki parametrów plazmy wytwarzanej w wyniku wyładowań impulsowych oraz przy użyciu laserów takich jak np. PHELIX w GSI (Niemcy) lub LULI (Francja). Ponadto można sądzić, że informacje o przesunięciach energetycznych poszczególnych linii rentgenowskich serii *L* i *M* wolframu w wyniku jonizacji zewnętrznych powłok mogą być niezwykle cenne, aby ułatwić diagnostykę plazmy w reaktorach termojądrowych typu tokamak (np. JET, WEST oraz ITER).

4.3.4.5. Inne badania teoretyczne służące diagnostyce plazmy wytwarzanej różnymi sposobami

Wykonano m.in. systematyczne badania teoretyczne dotyczące wpływu jonizacji zewnętrznych powłok na kształty linii rentgenowskich $K\alpha_{1,2}$ miedzi [H10] w celu umożliwienia interpretacji linii rentgenowskich emitowanych z różnych obszarów plazmy produkowanej w urządzeniu typu plasma-focus (PF-1000). Na Rysunku 2 w artykule [H10] przedstawiono teoretyczne widma słupkowe (położenia linii i ich względne intensywności) oraz przewidywane kształty linii $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$ [będące sumą kształtów naturalnych linii Lorentza oraz będące splotem sumy kształtów naturalnych linii Lorentza z instrumentalną funkcją Gaussa] dla różnych jonów miedzi (od Cu¹²⁺ do Cu²⁴⁺). Stwierdzono, że zrywanie elektronów 3p z zewnętrznych powłok wpływa bardzo wyraźnie na zmianę kształtu charakterystycznych linii $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$ miedzi, natomiast nieznacznie na ich położenia. Natomiast zrywanie elektronów z powłoki 2p wpływa bardzo istotnie zarówno na zmianę kształtu jak i na położenia linii $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$ miedzi. W związku z tym można sądzić, że w przypadku większej jonizacji niż q=20 zmiana położeń i kształtu charakterystycznych linii rentgenowskich $K\alpha_1$ i Ka2 miedzi będzie bardzo czułym narzędziem umożliwiających precyzyjną diagnostykę parametrów gestej plazmy zawierającej miedź. Należy podkreślić, że w artykule tym przedstawiono pierwsze systematyczne teoretyczne badania dotyczące wpływu zrywania elektronów z zewnętrznych powłok na położenia i kształty linii rentgenowskich serii K metali 3d-elektronowych, które mogą umożliwić diagnostykę parametrów plazmy nisko- i wysokotemperaturowej poprzez interpretację widm rentgenowskich emitowanych z plazmy wytwarzanej różnymi sposobami (np. w urzadzeniu PF-1000) [H10].

W artykule [H11] na Rysunku 1 przedstawiono wyniki szczegółowej analizy przesunięć energetycznych dla linii rentgenowskich ($K\alpha$ i $K\beta_1$) serii K molibdenu uzyskane metodą MCDF. Wyniki te wskazują na liniową zależność energii tych linii rentgenowskich wraz z liczbą zrywanych elektronów z zewnętrznych powłok, której nachylenie zmienia się wraz z rodzajem podpowłok z których usuwane są elektrony. Otrzymane wyniki mogą umożliwić diagnostykę parametrów plazmy niskotemperaturowej wytwarzanej różnymi metodami w przypadku metali o średniej liczbie atomowej Z (Mo, Pd, Nb) poprzez interpretację widm rentgenowskich emitowanych z tej plazmy. Plazma tego rodzaju może być wytwarzana w wyniku wyładowań impulsowych, np. na najpotężniejszym na świecie akceleratorze impulsowym, tzw. maszynie "Z" w Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA. Ponadto, plazmę o podobnych parametrach można generować przy użyciu laserów dużej mocy. Należy dodać, że uzyskane wyniki pozwalają na otrzymanie wiarygodnych informacji o stopniu jonizacji plazmy [H11].

W celu interpretacji widm pochodzących z niskotemperaturowej gęstej plazmy wytwarzanej w wyniku wyładowań impulsowych (na tzw. maszynie "Z") przeprowadzono szczegółowe modelowanie struktur rentgenowskich serii *K* i *L* dla jonów molibdenu [**H12**]. W artykule tym (na Rysunku 1) przedstawiono teoretyczne przewidywania struktur linii rentgenowskich serii *K* i *L* wykonane dla kilku jonów molibdenu w zakresie stanów ładunkowych od Mo³²⁺ do Mo³⁵⁺ (oraz ich sumy), jakie uzyskano przy użyciu pakietu FAC dla plazmy o temperaturze elektronowej 4.0 keV i gęstości elektronowej 1.7 x 10^{21} cm⁻³. Stwierdzono, że struktury linii rentgenowskich serii *K* i *L* dla jonów molibdenu (w zakresie od Mo³²⁺ do Mo³⁵⁺) na panelach [(a)-(d)] różnią się nieznacznie od siebie, natomiast ich superpozycja [panel (e)] różni się już zauważalnie od poszczegółową analizę widm rentgenowskich serii *L* jonów molibdenu dla wielu stopni jonizacji (od Mo³⁰⁺ do Mo³⁵⁺) w zakresie energii 2.2 – 4.0 keV. Stwierdzono, że struktura linii rentgenowskich dla poszczególnych jonów molibdenu znacznie się różni. Wraz ze zwiększaniem stopnia jonizacji bardzo istotnie zmieniają się struktury linii, a położenia poszczególnych linii przesuwają się silnie w kierunku wyższych energii. Najbardziej interesująca jest struktura na panelu (g) tego rysunku w pracy [**H12**],

która przedstawia superpozycję wszystkich przyczynków uwzględnionych w przeprowadzonym modelowaniu. Na Rysunku 3 w pracy [H12] porównano widmo rentgenowskie przewidziane teoretycznie [panel (g) [H12]] z widmem eksperymentalnym [S.B. Hansen et. al., Phys. Plasmas 21, 031202 (2014)] serii L molibdenu oraz z widmem teoretycznym przedstawionym w pracy tych autorów. Okazało się, że widmo teoretyczne uzyskane przeze mnie w wyniku modelowania przy użyciu pakietu FAC bardzo dobrze odtwarza widmo eksperymentalne [zdecydowanie lepiej niż przewidywane w artykule: S.B. Hansen et. al., Phys. Plasmas 21, 031202 (2014)].

4.3.5. Propozycja diagnostyki parametrów wysokotemperaturowej plazmy na podstawie widm rentgenowskich ciężkich metali rejestrowanych w reaktorach termojądrowych typu tokamak

Od pewnego czasu w niektórych reaktorach termojądrowych, takich jak ASDEX Upgrade (*Axially Symmetric Divertor Experiment*) używa się jako materiału do budowy ich elementów (np. divertorów) wolframu (pierwiastka o bardzo dużej liczbie atomowej Z). Oddziaływanie plazmy z elementami komory reaktora prowadzi do uwalniania nieznacznych ilości wolframu, przechodzącego w obszar plazmy centralnej. Warto podkreślić, że zastosowano ostatnio wolfram na największym obecnie funkcjonującym na świecie tokamaku JET oraz co ważniejsze planowane jest jego użycie w tokamaku nowej generacji, jakim będzie tokamak ITER. Dlatego zaistniała pilna potrzeba opracowania nowej precyzyjnej metody diagnostyki parametrów plazmy, wykorzystującej rejestrowane (z wysoką zdolnością rozdzielczą) struktury emisyjnego promieniowania rentgenowskiego pochodzącego od wolframu, w celu zapewnienia optymalnych warunków dla kontrolowanego pozyskiwania energii z syntezy termojądrowej.

Jak już wspomniałam wcześniej, szczególnie ważnym celem moich badań w ramach rozprawy habilitacyjnej było zaproponowanie nowej diagnostyki dla wysokotemperaturowej plazmy generowanej w reaktorach termojądrowych typu tokamak, której idea polega na dekompozycji rejestrowanych z wysoką zdolnością rozdzielczą widm rentgenowskich serii *M* wolframu oraz serii *L* molibdenu na uzyskane teoretycznie przyczynki, będące wynikiem modelowania tych widm dla określonej temperatury i gęstości elektronowej plazmy. Warto podkreślić, że na tokamaku JET w 1991 roku doszło do pierwszego (na świecie) kontrolowanego pozyskania energii z syntezy termojądrowej. Natomiast już w 1997 roku doszło do fuzji termojądrowej (trwającej kilkadziesiąt sekund), w wyniku której uzyskano 16 MW, co jest rekordem świata dla syntezy termojądrowej.

Geneza podjęcia przeze mnie badań dotyczących precyzyjnej diagnostyki plazmy, które stanowią istotną część mojej rozprawy habilitacyjnej wiąże się ze stażem, który odbyłam w 2010 roku (w ramach Grantu Rektora na wyjazd zagraniczny dla młodych pracowników naukowych) w Culham Science Centre, EFDA-JET CSU, Abingdon, Oxfordshire w Wielkiej Brytanii. Podczas mojej wizyty rozpoczęto pracę nad generalną modernizacją tokamaku JET, polegającą m.in. na zbudowaniu tzw. ITER-like Wall, tj. na zastosowaniu wolframu (jako materiału do konstrukcji divertora, który jest niezwykle istotnym elementem jego budowy. Dzięki użyciu wolframu konstrukcja tokamaka JET jest w stanie wytrzymać ogromne temperatury, sięgające setki milionów stopni Kelwina, a więc o wiele większej niż te, które panują we wnętrzu Słońca². Ostatnio w Culham Science Centre przygotowywane są kolejne kampanie (2017-2018) dotyczące fuzji termojądrowej (stosujących jako paliwo izotopy wodoru: deuteru i trytu).

² W związku z tym, przygotowałam projekt badawczy (przyjęty do finansowania przez Narodowe Centrum Nauki w 2011 roku i realizowany pod moim kierunkiem w latach 2012-2016), którego bardzo istotną częścią jest opracowanie diagnostyki parametrów wysokotemperaturowej plazmy w reaktorach termojądrowych typu tokamak w oparciu o linie rentgenowskie serii L i M ciężkich metali.

Warto w tym miejscu zaznaczyć, że prognozowane globalne zapotrzebowanie na energie podwoi się do 2050 roku, a więc potrzeba nowych źródeł energii nigdy nie była bardziej nagląca. Dlatego też wiedza uzyskana w wyniku szeroko zakrojonych międzynarodowych badań nad rozwijaniem nowych precyzyjnych metod diagnostyki wysokotemperaturowej plazmy, w których uczestniczę od kilku lat, w swoim perspektywicznym zamyśle ma służyć idei prowadzenia kontrolowanej syntezy termojądrowej izotopów wodoru (deuteru i trytu) jako alternatywnego źródła energii. Warto też podkreślić, że w przypadku kontrolowanej syntezy termojądrowej można uzyskać dużo więcej energii niż z rozszczepienia ciężkich jąder (najczęściej uranu) w dotychczas działających elektrowniach. Bardzo ważny jest również fakt, że do reakcji syntezy (fuzji) termojądrowej można użyć ogólnie dostępne złoża surowców naturalnych, takie jak woda zawierająca deuter oraz bardzo rozpowszechniony w przyrodzie lit służący do wytwarzania trytu, których Ziemia ma dostatek na miliony lat. W przypadku wystąpienia jakichkolwiek uszkodzeń w działaniu reaktora, dojdzie do schłodzenia paliwa i do zatrzymania syntezy termojądrowej. Będzie to więc bezpieczne źródło energii, mające znikomy wpływ na środowisko naturalne. Oczekuje się, że koszt produkcji energii w wyniku fuzji termojądrowej będzie porównywalny z kosztem energii uzyskiwanej ze spalania węgla i z odnawialnych źródeł energii.

W skrajnie wysokich temperaturach (znacznie przewyższających temperaturę Słońca, bo sięgających milionów stopni Kelwina), w których może przebiegać synteza termojądrowa, paliwo jest w postaci plazmy, która jest bardzo dobrym przewodnikiem prądu oraz utrzymywana jest przez grawitację i kształtowana przez pole magnetyczne. Emisja promieniowania pochodzącego z plazmy daje informację na temat składników w niej obecnych i może być wykorzystana jako narzędzie diagnostyczne, pozwalające na uzyskanie informacji o różnych parametrach plazmy, takich jak: zawartość zanieczyszczeń, gęstość i temperatura plazmy. Idee fuzji termojądrowej zaproponowali Rosjanie już w latach 50-tych, natomiast jej wykorzystanie do produkcji energii zapowiadano na lata 90-te. Fakt ciągłego wyczekiwania na istotny postęp w tych badaniach obrazuje skalę trudności całego przedsięwzięcia, a jednak ostatnio wiele wskazuje na to, że świat jest już bliski celu. Od 2011 roku na południu Francji w miejscowości Cadarache trwają prace nad wybudowaniem reaktora termojądrowego w ramach międzynarodowego projektu badawczego ITER, łączącego wkład Unii Europejskiej, USA, Japonii, Chin, Indii, Korei Południowej oraz Rosji.

Fenomen projektu ITER, w porównaniu z najbardziej efektywnym, znanym obecnie procesem pozyskiwania energii, czyli rozczepianiem uranu, tkwi w pełni kontrolowanym naśladowa-niu w warunkach ziemskich procesów zachodzących na Słońcu, możliwym do przerwania w każdej chwili. Naukowcy z całego świata od lat dążyli do długotrwałego przeprowadzania fuzji termojądrowej w celu wygenerowania olbrzymiej energii cieplnej. Obecnie staje się to coraz bardziej możliwe, również dzięki wykorzystaniu wyników badań powstałych z moim udziałem.

4.3.5.1. Modelowanie linii rentgenowskich serii *L* wolframu w plazmie wysokotemperaturowej w celu sprawdzenia wiarygodności różnych wariantów modelu CR

Wprowadzeniem do opracowania nowej procedury wykorzystującej rejestrowane z wysoką zdolnością rozdzielczą struktury widm promieniowania rentgenowskiego wolframu i molibdenu są szczegółowe badania dotyczące wiarygodności różnych wariantów modelu CR, których wyniki zostały przedstawione w artykule [H13]. W pierwszej części tej pracy zostały zaprezentowane wyniki modelowania struktur linii rentgenowskich serii *L* wolframu w plazmie wysokotemperaturowej, dla temperatur elektronowych przewidywanych dla największych tokamaków, takich jak budowany obecnie reaktor ITER. Modelowanie złożonych struktur widma radiacyjnego dla wysokozjo-nizowanego wolframu obecnego w plazmie zostało przeprowadzone poprzez uwzględnienie wpływu różnorodnych procesów zachodzących w plazmie wysokotemperaturowej.



Rysunek 9. Porównanie symulacji struktur linii rentgenowskich serii *L* dla N-podobnych (W^{67+}) do Mgpodobnych (W^{62+}) jonów wolframu, dla temperatury elektronowej 23 keV i gęstości elektronowej plazmy 1x10¹² cm⁻³, przewidzianych przy użyciu różnych wariantów modelu CR [panele (a)-(c)]. Panel (d) reprezentuje widmo zarejestrowane na urządzeniu SuperEBIT [*P. Beiersdorfer, J. Clementson, J. Dunn et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 144008 (2010)] [**H13**].

Jak już wspomniano wcześniej w punkcie 4.3.2.2., zawierającym opis pakietu obliczeniowego FAC, symulacje przeprowadzane są w trzech krokach. Pierwszy z nich polega na wyznaczeniu danych atomowych, takich jak: poziomy energetyczne i prawdopodobieństwa przejść (dla przejść promienistych i autojonizacji), ale także przekrojów czynnych dla wzbudzenia i jonizacji wynikającej elektronowego i procesów odwrotnych, tj. wychwytu radiacyjnego i oddziaływania Z bezradiacyjnego. Ocena wiarygodności różnych wariantów (nion = 1, nion = 2 i nion = 3) modelu CR, zastosowanych w kroku drugim symulacji, polegała na porównaniu wyników modelowania struktur linii rentgenowskich serii L jonów wolframu (od W⁶⁷⁺ do W⁶²⁺) w plazmie o temperaturze elektronowej 23 keV i gęstości elektronowej 1×10¹² cm⁻³, uzyskanych pakietem FAC w ramach poszczególnych wariantów. Wyniki tego porównania zostały przedstawione na Rysunku 9 [panele (a)-(c)] dla trzech wariantów modelu CR o wzrastającym poziomie zaawansowania, jakie użyto w pakiecie FAC. Należy zauważyć, że wszystkie trzy warianty przewidują bardzo podobną strukturę widma rentgenowskiego serii L wolframu w badanym zakresie energetycznym od 8.0 do 10.0 keV. Ponadto, najbardziej intensywne przyczynki do widma są zlokalizowane w regionie około 9.1-9.2 keV, a następne, mniej intensywne w regionie około 8.2-8.3 keV. Generalnie można zauważyć, że największe przyczynki pochodzą od kilku linii dla jonów wolframu W⁶²⁺ oraz W⁶⁴⁺.

Analizując szczegółowo poszczególne warianty modelu CR należy zauważyć, że najmniej złożony, jednojonowy model (*nion* = 1) [panel (a) na Rysunku 9] uwzględnia tylko bezpośrednie wzbudzenie zderzeniowe (CE) i następujący po nim zanik radiacyjny (RT). Model dwujonowy (*nion* = 2) [panel (b) na Rysunku 9] uwzględnia fotojonizację i wychwyt radiacyjny (RR) oraz wychwyt bezradiacyjny (DR) dla wolframu o ilości elektronów pomniejszonej o jeden (N - 1). Uzyskana za pomocą tego modelu struktura widma [panel (b)] jest podobna dla rejonu 9.1-9.2 keV jak na panelu (a), natomiast dla mniejszego zakresu energii struktura widma jest bardziej złożona, a przyczynki do widma są bardziej intensywne niż na panelu (a). Natomiast model trzyjonowy (*nion* = 3) [panel (c) na Rysunku 9] uwzględnia wzbudzenia rezonansowe (RE) oraz jonizacją zderzeniową (CI) z uwzględnieniem jonów o liczbie elektronów powiększoną o jeden (N + 1). Warto zwrócić uwagę, pod względem jakościowym, widmo wygląda bardzo podobnie jak widmo z panelu (b) dla modelu dwujonowego, ale dokładniejsza analiza pokazuje, że linie przedstawione w panelu (c) pochodzą od

dodatkowych stanów ładunkowych. Jak już wspomniano, widma otrzymane przy użyciu tych trzech wariantów modelu CR różnią się nieznacznie. Panel (d) prezentuje rentgenowskie widmo emisyjne wolframu, zarejestrowane przy użyciu spektrometru kalorymetrycznego na urządzeniu SuperEBIT (Lawrence Livermore National Laboratory, USA). Wszystkie przewidywane widma teoretyczne, pomimo różnicy w poziomie zaawansowania modelu CR, odtwarzają z dobrą dokładnością widmo eksperymentalne, natomiast widmo uzyskane dzięki opcji trzyjonowej [panel (c)] jest dokładniejsze od dwóch pozostałych [H13]³.

4.3.5.2. Modelowanie linii rentgenowskich serii *M* wolframu w celu weryfikacji wiarygodności zastosowanego modelu

Wyniki modelowania złożonych struktur linii rentgenowskich serii M jonów wolframu (od W⁴⁷⁺ do W⁴⁴⁺), uzyskane przy użyciu pakietu FAC w ramach modelu CR (wariant *nion=1*), dla dwóch temperatur elektronowych (4.1 keV i 3.3 keV) oraz gęstości elektronowej 5×10^{11} cm⁻³ (tj. dla parametrów odpowiednich dla tokamaku JET) zostały przedstawione na Rysunkach 10 i 11 [**H13**]. Należy podkreślić, że otrzymane wyniki pozwalają zweryfikować wiarygodność zaproponowanej procedury do diagnostyki plazmy (punkt 4.3.5.2.), polegającej na dekompozycji zarejestrowanych widm wolframu, produkowanych w tokamakach, na przyczynki przewidziane teoretycznie, odpowiadające różnym stopniom jonizacji. W związku z tym, na Rysunkach 10 i 11 porównano wyniki obliczeń wykonanych przy użyciu pakietu FAC z niezwykle precyzyjnymi danymi dla widm eksperymentalnych, uzyskanych na podstawie pomiarów na urządzeniu SuperEBIT.



Rysunek 10. Struktury linii rentgenowskich serii *M* dla Co-podobnych (W^{47+}) do Ni-podobnych (W^{46+}) jonów wolframu w zakresie 2.0-2.5 keV, dla temperatury elektronowej 4.1 keV i gęstości elektronowej plazmy 5×10^{11} cm⁻³, przewidziane przy użyciu pakietu FAC [panele (a)-(c)]. Panel (d) przedstawia widmo zarejestrowane na urządzeniu SuperEBIT [*J. Clementson, P. Beiersdorfer, G. V. Brown, M. F. Gu, Phys. Scr.* **81**, 015301 (2010)] dla podobnych parametrów [**H13**].

Rysunek 10 przedstawia struktury widm rentgenowskich serii M jonów wolframu [panel (a) dla W^{46+} oraz panel (b) dla W^{47+}], otrzymane przy użyciu pakietu FAC dla temperatury 4.1 keV i gęstości elektronowej 5×10^{11} cm⁻³ plazmy. Na panelu (d) przedstawiono widmo rentgenowskie serii *M*, zarejestrowane na urządzeniu SuperEBIT dla wolframu o temperaturze elektronowej plazmy 4.1

³ Badania te były finansowane w ramach projektu Narodowego Centrum Nauki (w latach 2012-2016), którego jestem kierownikiem oraz dwóch projektów (lata 2012 i 2013) w ramach programu EURATOM, w których byłam głównym wykonawcą.

keV. W celu odtworzenia kształtu tego eksperymentalnego widma dokonano superpozycji widm teoretycznych [patrz. panel (c)], zakładając udział przyczynków pochodzących od jonów wolframu W^{46+} [panel (a)] na 60%, natomiast udział jonów W^{47+} [panel (b)] na 40%. Jak można zauważyć, sumaryczne widmo teoretyczne [panel (c)] dobrze reprodukuje eksperymentalne widmo rentgenowskie serii *M* wolframu [**H13**], przedstawione na panelu (d).



Rysunek 11. Struktury linii rentgenowskich serii *M* dla Ni-podobnych (W^{46+}) do Zn-podobnych (W^{44+}) jonów wolframu w zakresie 2.0-2.5 keV, dla temperatury elektronowej 3.3 keV i gęstości elektronowej plazmy 5×10^{11} cm⁻³, przewidziane przy użyciu pakietu FAC [panele (a)-(d)]. Panel (e) przedstawia widmo zarejestrowane na urządzeniu SuperEBIT [*J. Clementson, P. Beiersdorfer, G. V. Brown, M. F. Gu, Phys. Scr.* **81**, 015301 (2010)] dla podobnych parametrów [**H13**].

Rysunku 11 przedstawia teoretyczne widma rentgenowskie serii M jonów wolframu [panel (a) dla W⁴⁴⁺, panel (b) dla W⁴⁵⁺, panel (c) dla W⁴⁶⁺], otrzymane przy użyciu pakietu FAC dla temperatury 3.3 keV i gęstości elektronowej plazmy 5×10^{11} cm⁻³, odpowiadającym parametrom osiąganym w tokamaku JET [**H13**]. Na panelu (e) przedstawiono widmo rentgenowskie serii M, zarejestrowane na urządzeniu SuperEBIT dla wolframu o temperaturze elektronowej plazmy 3.3 keV. W celu reprodukcji eksperymentalnego kształtu widma dokonano superpozycji widm teoretycznych [patrz. panel (d)], zakładając udział przyczynków pochodzących od jonów wolframu W⁴⁴⁺ [panel (a)] na 20%, udział jonów W⁴⁵⁺ [panel (b)] na 38%, natomiast udział jonów W⁴⁶⁺ [panel (c)] na 42%. Jak można zauważyć, sumaryczne widmo teoretyczne [panel (d)] dobrze odtwarza eksperymentalne widmo rentgenowskie serii M wolframu [**H13**], przedstawione na panelu (e).

Szczegółowa analiza przedstawiona na Rysunkach 10 i 11 pozwoliła na przeprowadzenie wiarygodnej interpretacji widm rentgenowskich serii *M* wolframu zarejestrowanych z wysoką zdolnością rozdzielczą na urządzeniu SuperEBIT. Analiza ta dostarcza informacji o zależności struktury zmierzonego widma wolframu (tj. m.in. względnych przyczynków pochodzących od różnych stopni jonizacji wolframu) od temperatury elektronowej plazmy. W związku z tym stwierdziłam, że zaproponowana dekompozycja zmierzonych widm rentgenowskich serii *M* wolframu na przyczynki teoretyczne, uzyskane w wyniku symulacji prowadzonych przy użyciu pakietu FAC w ramach modelu CR, jest czułym narzędziem, które może posłużyć do opracowania procedury umożliwiającej wyznaczanie parametrów plazmy wysokotemperaturowej wytwarzanej w jednym z największych na świecie tokamaków JET.

4.3.5.3. Szczegóły zaproponowanej procedury do wyznaczania parametrów wysokotemperaturowej plazmy

W celu określenia parametrów wysokotemperaturowej plazmy w reaktorach termojądrowych zaproponowałam zaawansowaną procedurę wykorzystującą rejestrowane z wysoką zdolnością rozdzielczą struktury widm rentgenowskich wolframu i molibdenu. Należy podkreślić, że pełna realizacja tej nowej procedury jest planowana w ramach długofalowego projektu, który został w 2015 roku zgłoszony (na lata 2017-2018) w ramach programu Horyzont 2020 oraz projektu EUROfusion⁴. Zaproponowana procedura składała się z trzech etapów przedstawionych poniżej.

(i) Uzyskanie uniwersalnej bazy teoretycznych wzorców (tzw. benchmarks) dla przewidywanych kształtów widm rentgenowskich wolframu i molibdenu

Od 2013 roku systematycznie tworzona jest uniwersalna (niezależna od specyficznych cech urządzenia, tj. tokamaka) baza odniesienia, tj. bogaty zestaw teoretycznych wzorców (tzw. benchmarks) struktur widm dla linii rentgenowskich serii M jonów wolframu oraz linii rentgenowskich serii L jonów molibdenu. Zestaw tych wzorców będzie wyznaczony w ramach modelu CR przy użyciu pakietu FAC dla różnej temperatury i gęstości elektronowej plazmy w szerokim zakresie energii (tj. szerokim obszarze długości fal) dla różnych rodzajów przejść rentgenowskich, różnych stopni jonizacji oraz różnych konfiguracji jonów wolframu i molibdenu. Etap ten jest już w chwili obecnej w znacznym stopniu zrealizowany (patrz. Rysunki 12,13 i 14).

(ii) Zgromadzenie zestawu szczegółowych wartości przyczynków do widm uzyskanych w wyniku rozkładu na wzorce [z etapu (i)] zarejestrowanych (z wysoką rozdzielczością) widm rentgenowskich dla danych warunków plazmy w reaktorze termojądrowym

Bardzo ważnym drugim etapem procedury jest tworzenie (oraz zgromadzenie) zbiorów szczegółowych wartości parametrów (specyficznych dla danego reaktora termojądrowego, tj. tokamaka oraz rodzaju rejestrującego widma spektrometru krystalicznego) dotyczących przyczynków do zmierzonych widm rentgenowskich pochodzących od różnych rodzajów przejść rentgenowskich, różnych jonów wolframu (i molibdenu) oraz ich różnych konfiguracji. Zbiory tych wartości parametrów zostaną wyznaczone dla plazmy wytworzonej w konkretnych warunkach reaktora termojądrowego (tj. o określonej temperaturze i gęstości) przez rozkład zarejestrowanych widm rentgenowskich na uzyskane teoretycznie (w etapie pierwszym) wzorce (benchmarks) struktur linii rentgenowskich serii *M* jonów wolframu oraz linii rentgenowskich serii *L* jonów molibdenu.

Należy dodać, że taki zestaw wzorcowych parametrów dla danego zakresu energii (lub długości fal) zgromadzony dla różnych temperatur i gęstości plazmy będzie stanowić fundament dla następnego trzeciego etapu (iii) procedury, tj. do określenia nieznanych parametrów plazmy na podstawie szczegółów struktury zarejestrowanych widm rentgenowskich ciężkich metali. Gromadzenie tego zbioru szczegółowych wartości parametrów jest obecnie w trakcie realizacji. Należy jednocześnie podkreślić, że praca [H14] przedstawia zastosowanie etapu pierwszego (i) i drugiego (ii) proponowanej procedury, co umożliwiło pierwszą wiarygodną interpretację widma rentgenowskiego zarejestrowanego przy użyciu spektrometru KX1 na tokamaku JET.

⁴ Enabling Research Proposal: "New advanced approach to determine the plasma parameters on the basis of the interpretation of the high-resolution tungsten and molybdenum x-ray spectra generated by high-temperature tokamak plasmas" (CfP-AWP17-ENR-IPPLM-04).

(iii) Określenie parametrów przykładowej plazmy w wyniku interpretacji zarejestrowanych (z wysoką rozdzielczością) widm rentgenowskich dla danego reaktora

Dla plazmy produkowanej w specyficznych nieznanych warunkach reaktora termojądrowego określone zostaną jej parametry (tj. temperatura i gęstość) na drodze interpretacji zarejestrowanych z wysoką zdolnością rozdzielczą widm rentgenowskich serii *M* wolframu i serii *L* molibdenu. W ramach tego etapu zostanie wyznaczony, procedurą analogiczną jak w etapie (**ii**), zestaw wartości parametrów dotyczący przyczynków pochodzących od konkretnych jonów wolframu i molibdenu. Te specyficzne wartości parametrów uzyskane dla tej nieznanej plazmy (generowanej w szczególnych warunkach) pozwolą na uzyskanie informacji o jej temperaturze i gęstości elektronowej za pomocą procedury dopasowania do bogatego zestawu tych parametrów, zgromadzonych na etapie (**ii**). Warto dodać, że efektywne zastosowanie procedury dopasowania będzie prawdopodobnie wymagało uwzględnienia pewnych warunków brzegowych odnoszących się do konkretnych struktur zarejestrowanych widm (takich jak: rodzaj uwzględnionych przejść rentgenowskich, orientacyjny stopień jonizacji oraz typ konfiguracji elektronowej jonów wolframu i molibdenu).

4.3.5.4. Interpretacja widm rentgenowskich o wysokiej zdolności rozdzielczej zarejestrowanych na tokamaku JET

Jak już wspomniałam dla przedłożonego materiału stanowiącego podstawę dorobku habilitacyjnego kluczowy jest ostatnio opublikowany artykuł [H14]⁵, w którym przedstawiłam wyniki zastosowania dwóch pierwszych etapów zaproponowanej procedury (patrz punkt 4.3.5.2). Procedura ta umożliwiła uzyskanie pierwszej wiarygodnej interpretacji widm rentgenowskich zarejestrowanych na tokamaku JET za pomocą spektrometru krystalicznego o wysokiej zdolności rozdzielczej KX1.

4.3.5.4.1. Widma wzorcowe dla linii rentgenowskich serii *M* jonów wolframu (od W⁴⁴⁺ do W⁵²⁺)

Przewidziane przeze mnie teoretycznie kształty linii rentgenowskich serii M wolframu, dla różnych stopni jonizacji (od W⁴⁴⁺ do W⁵²⁺) oraz dla określonych parametrów plazmy (tj. temperatury i gęstości elektronowej), zostały wykorzystane do opracowywania szczegółowych widm wzorcowych (tzw. benchmarks). Na Rysunku 12 [**H14**] przedstawiono widma wzorcowe linii rentgenowskich serii M wolframu (dla jonów od W⁴⁴⁺ do W⁵²⁺) dla plazmy o temperaturze elektronowej 4.2 keV i gęstości elektronowej 3×10^{13} cm⁻³.

Należy zauważyć, że na Rysunku 12 są prezentowane dla jonów wolframu (od W⁴⁴⁺ do W⁵²⁺) nie tylko słabe linie 4d \rightarrow 3p (przejścia $M_3N_{4,5}$) na panelach od (a) do (d), ale również wiele razy intensywniejsze linie 4f \rightarrow 3d (przejścia M_4N_6 i $M_5N_{6,7}$) w przypadku paneli od (e) do (i). Ponadto, wraz ze zwiększaniem stopnia jonizacji położenia poszczególnych linii przesuwają się w kierunku wyższych energii (czyli na panelach w kierunku mniejszej długości fali). Analiza Rysunku 12 wskazuje, że złożoność wzorców zależy od zakresu energii (zakresu długości fali) w pomiarach doświadczalnych. Ponadto, jeśli spektrometr o wysokiej rozdzielczości mógłby rejestrować widma w szerszym zakresie energii (wyższym zakresie długości fali) to byłoby możliwe, aby obserwować przejścia 4f \rightarrow 3d nawet w niższej temperaturze plazmy [**H14**].

⁵ Badania te były finansowane w ramach kierowanego przeze mnie projektu Narodowego Centrum Nauki (w latach 2012-2016) oraz 2 projektów (na lata 2014 i 2015) w ramach programu EUROfusion, których byłam głównym wykonawcą.



Rysunek 12. Przewidziane teoretycznie struktury linii rentgenowskich serii *M* dla poszczególnych jonów wolframu od W^{44+} do W^{52+} [panele (a)-(i)] w plazmie o temperaturze elektronowej 4.2 keV i gęstości elektronowej $3x10^{13}$ cm⁻³, w zakresie 5.0-5.35 Å, uzyskane przy użyciu pakietu FAC [**H14**].

Przewidywane teoretycznie kształty linii rentgenowskich serii *L*, wyznaczone dla różnych stopni jonizacji molibdenu (od Mo³⁵⁺ do Mo³⁰⁺), dla temperatury elektronowej 4.2 keV i gęstości elektronowej 3×10^{13} cm⁻³ zostały pokazane na Rysunku 2 w artykule [**H14**]. Stwierdzono tam, że widma pochodzące od poszczególnych jonów molibdenu znacznie różnią się strukturą. Można ponadto zaobserwować, że najbardziej intensywne przyczynki występują na panelu (c).

Ponadto moje wstępne badania pokazały, że temperatura elektronowa plazmy nie wpływa zauważanie na kształty widm rentgenowskich serii M dla niektórych jonów wolframu (np. W⁴⁴⁺ i W⁴⁶⁺), dla wąskiego zakresu długości fali (rejestrowanych przy użyciu spektrometru KX1). Natomiast, w przypadku jonu W⁴⁵⁺ i W⁴⁷⁺ wpływ temperatury na kształt przewidywanych widm rentgenowskich jest znaczący i wymaga szczegółowego uwzględnienia indywidualnych przyczynków pochodzących od różnej konfiguracji elektronowej oraz rodzajów przejść rentgenowskich [*K. Słabkowska et al.*, "*The individual M x-ray line contributions originating from Cu- and Co-like tungsten for various plasma temperature*", *Phys. Scr.*, submitted for publication in December 2015].

4.3.5.4.2. Szczegółowa analiza przyczynków od linii rentgenowskich serii M dla jonu W^{45+}

Dotychczasowe próby interpretacji widm eksperymentalnych zarejestrowanych (dla różnych temperatur elektronowych) na tokamaku JET za pomocą spektrometru krystalicznego o wysokiej zdolności rozdzielczej KX1 pokazały, że opracowane przeze mnie widma wzorcowe są kluczowe dla dokonania ich wiarygodnej interpretacji. Okazało się jednak, że w przypadku jonu wolframu W^{45+} , efektywny kształt przewidziany przy zastosowaniu pakietu FAC nie reprodukuje poprawnie eksperymentalnie zarejestrowanego kształtu widma. W związku z tym konieczna była szczegółowa analiza uzyskanych teoretycznie kształtów, odpowiadających przejściom rentgenowskim 4d \rightarrow 3p rozseparowanym na przyczynki pochodzące od stanów mających obsadzone podpowłoki 4s¹, 4p¹, 4d¹, 4f¹ dla jonu wolframu W⁴⁵⁺ (patrz Rysunek 13) [H14]. Panele [(a)-(d)] na tym rysunku przedstawiają przewidywania teoretyczne struktury widma rentgenowskiego serii *M* pochodzące od poszczególnych przyczynków, a piąty panel (e) przedstawia sumaryczne widmo, utworzone w wyniku superpozycji widm (a), (b), (c) i (d). Stwierdzono, że dla jonu wolframu W⁴⁵⁺ przyczynki

odpowiadające obsadzeniu podpowłok o wyższej liczbie kwantowej *l* są w sposób drastyczny przeszacowane w stosunku do przyczynku od stanu $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s1o$ najniższej energii, co było przyczyną tych rozbieżności.

Jak już wspomniałam, sumaryczne widmo przewidziane teoretycznie [panel (e)] odbiega drastycznie od prostej struktury (panel (d)) odpowiadającej stanowi $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$, co zostało przedstawione na Rysunku 13. Fakt ten uniemożliwiał uzyskanie poprawnej reprodukcji widma eksperymentalnego zarejestrowanego na tokamaku JET przy wykorzystaniu sumarycznego widma przedstawionego na Rysunku 13 w panelu (e). Jednocześnie przedstawiona powyżej analiza wskazuje, że do interpretacji widm eksperymentalnych zarejestrowanych na tokamaku JET za pomocą spektrometru krystalicznego KX1 należy w przypadku jonu W⁴⁵⁺ poszczególne przyczynki do widma (pochodzące od stanów $4s^1$, $4p^1$, $4d^1$, $4f^1$) wykorzystać w sposób niezależny.



Rysunek 13. Przyczynki do widma rentgenowskiego serii *M* pochodzące od jonu wolframu W^{45+} [panele (a)-(d)] oraz sumaryczne widmo przewidziane teoretycznie [panel (e)] (utworzone w wyniku superpozycji tych przyczynków), dla temperatury elektronowej 4.2 keV i gęstości elektronowej plazmy $3x10^{13}$ cm⁻³, w zakresie 5.192 - 5.232 Å [**H14**].

4.3.5.4.3. Szczegółowa analiza przyczynków do linii rentgenowskich serii M dla jonu W⁴⁷⁺

W przypadku jonu wolframu W^{47+} okazało się (podobnie jak dla jonu W^{45+}), że efektywny kształt przewidziany przy zastosowaniu pakietu FAC nie reprodukuje niektórych szczegółów eksperymentalnie zarejestrowanego, na tokamaku JET za pomocą spektrometru krystalicznego KX1, kształtu widma rentgenowskiego w zakresie 5.192 - 5.232 Å. Na Rysunku 14 [**H14**] przedstawiono szczegółową analizę przewidzianych teoretycznie przyczynków pochodzących od przejść rentgenowskich typu $3p^53d^94d^1 \rightarrow 3p^63d^9$ [panel (a)] oraz typu $3p^53d^94s^1 \rightarrow 3p^63d^9$ [panel (b)] do linii rentgenowskich serii *M* dla jonu wolframu W^{47+} . Trzeci panel (c) przedstawia sumaryczne widmo, tj. efektywny kształt przewidziany przy zastosowaniu pakietu FAC, będący superpozycją widm (a) i (b), które nie reprodukuje niektórych szczegółów eksperymentalnie zarejestrowanego widma na tokamaku JET. W związku z tym, dla jonu wolframu W^{47+} zaistniała konieczność niezależnego uwzględnienia obu przyczynków [4d - panel (a) i 4s - panel (b) na Rysunku 14] do widma serii *M* wolframu, podczas realizacji drugiego etapu procedury (**ii**) przedstawionej w punkcie 4.3.5.2., a w praktyce zastosowanej i opisanej w punkcie 4.3.5.4.



Rysunek 14. Przyczynki do widma rentgenowskiego serii *M* pochodzące od jonu wolframu W^{47+} [panel (a)-(b)] oraz sumaryczne widmo przewidziane teoretycznie [panel (c)] (utworzone w wyniku superpozycji tych przyczynków), dla temperatury elektronowej 4.2 keV i gęstości elektronowej plazmy $3x10^{13}$ cm⁻³, w zakresie 5.192 - 5.232 Å [**H14**].

4.3.5.5. Pierwsza wiarygodna interpretacja widm rentgenowskich ciężkich metali zarejestrowanych z wysoką zdolnością rozdzielczą na tokamaku JET

Przedstawiona powyżej szczegółowa analiza przewidywanych teoretycznie struktur linii rentgenowskich serii M wolframu i serii L molibdenu dla różnych jonów tych metali umożliwiła mi dokonanie pierwszej wiarygodnej interpretacji zarejestrowanych na tokamaku JET widm rentgenowskich za pomocą spektrometru krystalicznego o wysokiej zdolności rozdzielczej KX1 (patrz Rysunek 15). Poszczególne panele na tym rysunku przedstawiają przewidywania widm rentgenowskich serii M dla jonów wolframu W⁴⁶⁺, W⁴⁵⁺ i W⁴⁷⁺, widm rentgenowskich serii L dla jonu molibdenu Mo³²⁺ oraz widmo sumaryczne i eksperymentalne (zarejestrowane na tokamaku JET). Należy dodać, że interpretacja przedstawiona w tym punkcie ilustruje drugi etap procedury (**ii**), przedstawiony w punkcie 4.3.5.2⁶.

Panel górny (a) na Rysunku 15 przedstawia widmo rentgenowskie serii M dla jonu wolframu W^{46+} , panel (b) – prezentuje 4 przyczynki do widma rentgenowskiego serii M pochodzące od jonu wolframu W^{45+} , z kolei na panelu (c) przedstawiono 2 przyczynki do widma rentgenowskiego serii M dla jonu wolframu W^{47+} , panel (d) przedstawia przewidywania widm rentgenowskich serii L dla jonu molibdenu Mo^{32+} . Piąty panel (e) jest sumarycznym widmem przewidzianym teoretycznie, utworzonym w wyniku superpozycji widm (a), (b), (c) i (d). Natomiast panel (f) przedstawia widmo eksperymentalne zarejestrowane dla identycznych parametrów [**H14**].

Należy podkreślić (co można zauważyć analizując szczegółowo panel (b) na Rysunku 15), że efektywne przyczynki pochodzące od stanów mających obsadzone podpowłoki $4s^1$, $4p^1$, $4d^1$, $4f^1$ do linii rentgenowskich serii *M* dla jonu wolframu W⁴⁵⁺ dramatycznie odbiegają od sumarycznego kształtu zaprezentowanego na Rysunku 15 [panel (e)], który został przewidziany teoretycznie w ramach modelu CR przy użyciu pakietu FAC. Poprawne zreprodukowanie widm eksperymenttalnych było możliwe przy założeniu dominujących przyczynków pochodzących od stanów 4s i 4p, natomiast nieznacznych od stanów 4f i 4d [panel (b) Rysunek 15]. Jak łatwo można stwierdzić, uzyskane sumaryczne widmo teoretyczne [panel (e) Rysunek 15] umożliwiło po raz pierwszy **[H14**]⁷

⁶ Badania te były finansowane w ramach kierowanego przeze mnie projektu Narodowego Centrum Nauki (w latach 2012-2016) oraz 2 projektów(na lata 2014 i 2015) w ramach programu EUROfusion, których byłam głównym wykonawcą.

⁷ Najczęściej czytany artykuł (najwięcej pobrań) dostępny na stronie czasopisma Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical pod linkiem <u>http://iopscience.iop.org/0953-4075/labtalk-article/62029</u>. W związku z tym redakcja czasopisma zwróciła 20

bardzo dobrą reprodukcję widma eksperymentalnego, zarejestrowanego z wysoką zdolnością rozdzielczą na tokamaku JET, przedstawionego na ostatnim panelu [panel (f) Rysunek 15].



Rysunek 15. Struktury linii rentgenowskich serii *M* dla jonów wolframu: W^{46+} [panel (a)], W^{45+} [panel (b)], W^{47+} [panel (c)], serii *L* dla jonu molibdenu Mo³²⁺ [panel (d)] oraz sumaryczne widmo utworzone w wyniku superpozycji widm (a), (b), (c) i (d) dla temperatury elektronowej 4.2 keV i gęstości elektronowej plazmy 3×10^{13} cm⁻³, w zakresie 5.192 - 5.232 Å, przewidziane przy użyciu pakietu FAC [panel (e)]. Panel (f) przedstawia widmo eksperymentalne zarejestrowane dla identycznych parametrów [H14].

Chciałabym podkreślić, że przedyskutowane powyżej wyniki moich badań stanowią tylko niewielką część wszystkich zrealizowanych badań, umożliwiających dokonanie wiarygodnej interpretacji, zaproponowanej przez mnie procedury, wielu widm rentgenowskich zarejestrowanych na tokamaku JET za pomocą spektrometru krystalicznego o wysokiej zdolności rozdzielczej KX1. Wielki sukces tej procedury, polegającej w drugim etapie (**ii**) na dekompozycji eksperymentalnych widm na przyczynki teoretyczne pochodzące od linii rentgenowskich serii M wolframu oraz linii serii L molibdenu, odpowiadające różnym stopniom jonizacji tych pierwiastków, potwierdza słuszność tej idei. Należy jednak podkreślić, że zastosowanie pełnej procedury jest zadaniem na kolejne lata i będzie realizowane m. in. w ramach długofalowego projektu, który został w 2015 roku zgłoszony (na lata 2017-2018) w ramach programu Horyzont 2020 oraz projektu EUROfusion.

się do mnie z prośbą o przygotowanie krótkiego streszczenia tego artykułu w celu zareklamowania go szerszemu gronu odbiorców (z uwagi na jego ważne przesłanie związane z przyszłościową produkcją energii w wyniki fuzji termojądrowej). Ponadto, artykuł ten został zacytowany w 2016 roku w pracy: X. Ding et al. Physics Letters A 380, 874–877 (2016) (http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2015.12.034).

4.4. Najważniejsze osiągnięcia badań przeprowadzonych w ramach rozprawy habilitacyjnej

Bardzo ważnym osiągnięciem moich badań było wyjaśnienie nieznanej wcześniej względnej roli mechanizmów powstawania stanów z dwiema dziurami w powłoce K atomów oraz natury procesów deekscytacji stanów wielodziurowych tych układów. Wyniki przeprowadzonych badań pokazały m.in., że absorpcja pojedynczego fotonu przez atom może prowadzić do usunięcia obu elektronów z powłoki K, tzw. podwójnej fotojonizacji, co może nastąpić na skutek jednego z dwóch mechanizmów, tj. mechanizmu 'shakeoff' (SO, rozpatrywanego w opisie kwantowym) oraz mechanizmu 'knockout' (KO, rozpatrywanego półklasycznie)⁸ [H2].

Innym również bardzo ważnym moim osiągnięciem było zaproponowanie kilku wariantów metody umożliwiającej diagnostykę niskotemperaturowej gęstej plazmy, wykorzystującej wyniki moich przewidywań teoretycznych dla parametrów linii serii K, L i M charakterystycznego promieniowania rentgenowskiego ciężkich metali. Specyficzne warianty zależą od sposobów wytwarzania plazmy oraz od różnych charakterystyk urządzeń służących do rejestracji emitowanych widm rentgenowskich. Szczególnie ważnym moim osiągnięciem było dokonanie po raz pierwszy dekompozycji zarejestrowanych z wysoką zdolnością rozdzielczą linii $L\beta_2$ na przyczynki teoretyczne (odpowiadające poszczególnym stopniom jonizacji). W wyniku tych badań uzyskano rozkład ładunkowy jonów wolframu w stanie plazmy bez wykorzystania dodatkowych modeli teoretycznych (tj. hydrodynamicznych, kinetycznych). Stwierdzono również, że struktura zarejestrowanych z wysoką zdolnością rozdzielczą linii rentgenowskich serii L ciężkich pierwiastków może być użyta jako czułe narzędzie do diagnostyki parametrów plazmy [H4, H5, H6]. Kolejnym osiągnieciem moich badań była propozycja alternatywnej interpretacji zarejestrowanych z wysoką rozdzielczością struktur rentgenowskich serii K i L jonów molibdenu [S.B. Hansen et. al., Phys. Plasmas 21, 031202 (2014)] pochodzących z gorącej gęstej plazmy (o temperaturze elektronowej ok. 4.0 keV), wytwarzanej w wyniku wyładowań impulsowych na akceleratorze impulsowym, tzw. maszynie "Z" w Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA. Interpretacja ta była możliwa dzięki przeprowadzeniu zaawansowanego modelowania [H12], za pomocą rozbudowanego pakietu FAC dla linii rentgenowskich serii K i L dla jonów molibdenu w stanie plazmy.

Największym osiągnięciem przeprowadzonych przeze mnie badań było zaproponowanie nowej metody diagnostyki parametrów wysokotemperaturowej plazmy oraz opracowanie w związku z tym zaawansowanej procedury wykorzystującej rejestrowane z wysoką zdolnością rozdzielczą struktury widm promieniowania rentgenowskiego wolframu i molibdenu w celu wyznaczenia jej parametrów w reaktorach termojądrowych typu tokamak. Jednocześnie należy dodać, że pełna realizacja tej trzyetapowej procedury jest planowana w ramach długofalowego projektu, który został w 2015 roku zgłoszony (na lata 2017-2018) w ramach programu Horyzont 2020 oraz projektu EUROfusion. Zaproponowana metoda diagnostyki parametrów wysokotemperaturowej plazmy umożliwiła przeprowadzenie pierwszej wiarygodnej interpretacji widm rentgenowskich [H14] zarejestrowanych na tokamaku JET za pomocą spektrometru krystalicznego o wysokiej zdolności rozdzielczej KX1 w wyniku dekompozycji tych widm na przyczynki teoretyczne pochodzące od linii rentgenowskich serii M wolframu oraz linii serii L molibdenu, odpowiadające różnym stopniom jonizacji tych pierwiastków.

Należy dodać, że zaproponowana przeze mnie nowa procedura jest szczególnie ważna w związku z przygotowaniami prowadzonymi ostatnio w Culham Science Centre w ramach kolejnych kampanii przewidzianych na lata 2017-2018, które dotyczą fuzji termojądrowej stosujących jako paliwo izotopy wodoru: deuter i tryt. Ta procedura jest również niezwykle istotna w związku z budową od 2011 roku nowego reaktora termojądrowego ITER w ramach wielkiego

⁸ Za powyższe osiągnięcie uzyskałam w roku 2012 Nagrodę Rektora UMK za działalność naukowo-badawczą, pt.: "Zaproponowanie nowatorskiego podejścia dostarczającego fundamentalnych informacji o względnej roli mechanizmów oddziaływania fotonu z elektronami powłoki K atomu prowadzącego do wytwarzania atomów wydrążonych".

międzynarodowego projektu Unii Europejskiej, USA, Japonii, Chin, Indii, Korei Południowej oraz Rosji. W związku z faktem, że efektywna produkcja energii w budowanym obecnie tokamaku ITER, będzie możliwa dopiero przy temperaturach znacznie wyższych (25 - 40 keV) niż w największym dotychczas działającym tokamaku JET (ok. 3 - 8 keV), tylko diagnostyka oparta o widma rentgenowskie metali o bardzo dużej liczbie atomowej Z (tj. wolframu) będzie mogła być wystarczająco czułym narzędziem do wyznaczania parametrów plazmy w tych ekstremalnych warunkach.

4.5. Plany badawcze

Kontynuacją moich badań przedstawionych w artykułach [**H1, H2**] są badania prowadzone od 2014 roku w ramach bardzo intensywnej i szeroko zakrojonej współpracy z prof. Yoshiaki Ito (Laboratory of Atomic and Molecular Physics, Institute of Chemical Research, Kyoto University, Japonia) i jego zespołem (Y. Ito, T. Tochio, H. Ohashi, S. Fukushima), z profesorem P. Indelicato (Sorbonne Université's, UPMC Univ. Paris 06, France) oraz z profesorami z Portugalii (J. P. Marques, M. C. Martins, F. Parente i J. P. Santos). Badania te dotyczą analizy wygenerowanych z użyciem największego synchrotronu na świecie – *SPring-8* (Japan Synchrotron Radiation Research Institute, Hyogo, Japan) widm rentgenowskich serii *K*, *L* i *M* dla szerokiego zakresu pierwiastków, które zostały zarejestrowane przy użyciu podwójnego antyrównoległego spektrometru krystalicznego o niezwykle wysokiej zdolności rozdzielczej (jednego z najdokładniejszych urządzeń tego typu na świecie). Dotychczasowa nasza współpraca koncentrowała się na wyjaśnieniu zarejestrowanych z wielką precyzją specyficznych asymetrycznych kształtów rentgenowskich linii K $\alpha_{1,2}$ różnorodnych pierwiastków. Zaowocowała już ona obszernym artykułem, pt.: "*The K\alpha_{1,2} X-ray line widths, asymmetry indices, and [KM] shake probabilities in Ca to Ge elements with theoretical considerations of shake processes in Ca, Ti, and Ge"*, który został ostatnio złożony do publikacji w czasopismie **Physica Scripta**.

Szczególne znaczenie będą miały moje badania dotyczące wiarygodnej interpretacji widm rentgenowskich zarejestrowanych na tokamaku JET za pomocą spektrometru krystalicznego o wysokiej zdolności rozdzielczej KX1, które będą kontynuacją badań przedstawionych w artykule [H14]. To szczególne znaczenie tej problematyki ma bezpośredni związek z moim uczestnictwem w badaniach prowadzonych w Culham Science Centre nad przygotowywaniem najbliższych kampanii deuterowo-trytowej (D-T), dotyczących fuzji termojądrowej (stosujących jako paliwo izotopy wodoru: deuteru i trytu). Kampania przewidziana na lata 2017-2018, rozpocznie się zaraz po zakończeniu eksperymentów związanych z badaniami wpływu zastosowanej ostatnio tzw. ITER-like wall na parametry uzyskiwanej wysokotemperaturowej plazmy. Kampania D-T związana będzie ściśle z przygotowaniami do uruchomienia ITER-a, a jej program opracowany został w ścisłej współpracy ze specjalistami z ITER Organization (IO) oraz Fusion for Energy (F4E). W opinii prof. Henri Weisena (Deputy Task Force Leader from ITER Physics Department responsible for new diagnostics on JET with ITER-like wall) oraz dr Amy Schumack opracowana przeze mnie propozycja szczegółowej diagnostyki parametrów plazmy, wykorzystująca m.in. zaawansowane modelowanie bardzo złożonych struktur widm rentgenowskich serii M i L wysokozjonizowanego wolframu, bedzie kluczowa dla osiagniecia sukcesu tej kampanii. Ponadto w 2015 roku podjełam współpracę z Prof. Romanem Zagórskim i dr Maryna Chernyshova (Instytut Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy w Warszawie) oraz z naukowcami z Francji [m.in. z dr Didierem Mazon z Francuskiego Komisariatu ds. Energii Atomowej (CEA)] w ramach nowego projektu europejskiego (lata 2015-2018), pt.: "Development of soft X-ray GEM based detecting system for tomographic tungsten focused transport monitoring". Projekt ten dotyczy diagnostyki plazmy, która będzie generowana na tokamaku WEST.

W ciągu najbliższych kilku lat zamierzam także podjąć się realizacji zupełnie dla mnie nowych badań interdyscyplinarnych obejmujących nie tylko (jak dotychczas) relatywistyczną mechanikę kwantową i spektroskopię rentgenowską, ale również fizykę jądrową. Te przyszłe badania dotyczą przeprowadzenia kompleksowej analizy optymalnych warunków do przygotowania eksperymentów umożliwiających, po raz pierwszy, zaobserwowanie zajścia procesu NEEC (*Nuclear Excitation by Electron Capture*), czyli wzbudzenia jądra poprzez wychwyt elektronu dla izomerów jądrowych (tj. metastabilnych stanów jąder) kilku pierwiastków. Będą się one koncentrowały na szczególnie interesujących przypadkach procesów NEEC dla izomerów jądrowych, dla których możliwe jest wzbudzenie jąder ze stanów metastabilnych (np. ^{93m}Mo o czasie połowicznego rozpadu T_{1/2} ~ 6.8 h) do stanu o nieznacznie większej energii, a mniejszej wartości spinu, co powoduje jego szybką deekscytację do stanu podstawowego w wyniku emisji sekwencji fotonów gamma, czemu towarzyszy niemal natychmiastowe uwolnienie ogromnej energii rzędu wielu MeV/jądro.

Warto podkreślić, że badania przeprowadzone dotychczas wykazały, że zdecydowana większość trudności w przezwyciężeniu barier, które przez niemal 40 lat uniemożliwiały obserwację procesu NEEC (pomimo wielu prób, dla jakiegokolwiek stanu jądra izomerycznego), wynikały głównie z niedostatecznego uwzględnienia w projektowaniu dotychczasowych eksperymentów kluczowej roli złożonych procesów atomowych w zapewnieniu warunków rezonansu.

Należy oczekiwać, że wyniki planowanych badań, umożliwiających zidentyfikowanie tego nowego zjawiska fizycznego, będą stanowić punkt wyjścia do badań stosowanych, związanych z umożliwieniem kontrolowanego uwalniania energii (nieformalnie nazywanym "isomer switching" lub "isomer triggering") zgromadzonej w izomerach jądrowych wybranych pierwiastków, co powinno przyczynić się, w nieodległej przyszłości, do rozwoju koncepcji nowych, niekonwencjonalnych i ultra-wydajnych baterii jądrowych. Aplikacje te mogą mieć zastosowanie zwłaszcza przy zasilaniu napędów pojazdów używanych w trudno dostępnych lokalizacjach na Ziemi (np. na dnie oceanów czy kraterów wulkanicznych) i w przestrzeni kosmicznej. Należy podkreślić, że wszelkie aspekty dotyczące szczegółowych wymogów eksperymentalnych zapewniających obserwację procesów NEEC będą przygotowywane we współpracy z światowej klasy specjalistami z USA (J.J. Carroll - Army Research Laboratory, Adelphi, Maryland; C.J. Chiara - Oak Ridge Associated Universities; M.P. Carpenter - Physics Division, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois; D.J. Hartley - United States Naval Academy, Annapolis) oraz Australii (R.V. F. Janssens i G.J. Lane - Department of Nuclear Physics, Australian National University, Canberra). Ponadto, chciałabym nadmienić, że w grudniu 2015 roku złożyliśmy do Narodowego Centrum Nauki wniosek o finansowanie projektu badawczego (w ramach konkursie OPUS 10), który dotyczy projektowania optymalnych warunków dla pierwszej obserwacji eksperymentalnej procesu nuklearnego wzbudzenia poprzez wychwyt elektronu dla izomerów jądrowych.

4.6. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo – badawczych

4.6.1. Badania wchodzące w skład rozprawy doktorskiej [1,2,4,5,7-11,13,14,16]

W 1999 roku podjęłam badania teoretyczne metodą MCDF, których celem była interpretacja linii rentgenowskich serii *K* emitowanych przez pociski (jony siarki) przechodzące z różnymi energiami przez folie węglowe. Umożliwiły one poznanie wpływu jonizacji powłok *L* i *M* siarki na parametry [1] oraz strukturę [7] jej linii rentgenowskich serii *K*. Badania te pozwoliły na wyznaczenie zależności średniej liczby dziur w powłokach *L* i *M* jonów siarki od ich energii w czasie przechodzenia przez folie węglowe [2]. W przypadku widm rentgenowskich linii serii *K* emitowanych przez bardzo szybkie jony siarki przechodzące przez folie węglowe, oprócz przejść satelitarnych $K\alpha$ i $K\beta$ zaobserwowano analogiczne przejścia hipersatelitarne $K\alpha^h$ i $K\beta^h$ [5]. Zaproponowany model teoretyczny umożliwił oszacowanie prawdopodobieństw wystąpienia dominujących konfiguracji jonów siarki, emitujących widma rentgenowskie o charakterystycznych parametrach [5,9]. W 2004 roku zajęto się wyznaczeniem średniego ładunku równowagowego dla jonów siarki przechodzących przez tarcze glinową, tytanową i żelazową w oparciu o zaproponowaną analizę teoretyczną zmierzonych energii linii satelitarnych w widmach rentgenowskich, emitowanych przez jony siarki penetrujące te tarcze [16].

W 2001 roku podjęłam badania teoretyczne metodą MCDF nad interpretacją linii rentgenowskich serii K [4, 11, 14], L [8] i M [10] emitowanych przez atomy tarcz bombardowane różnymi wysokoenergetycznymi jonami. W 2004 roku przedstawiłam wyczerpującą dyskusję na temat wpływu jonizacji poszczególnych podpowłok powłoki M na szczegóły struktury linii rentgenowskich $K\beta_2$ dla Mo i Pd [14]. Zastosowanie wyników moich systematycznych badań teoretycznych pozwoliło po raz pierwszy rozłożyć zmierzone linie $K\beta_2$ na niezależne przyczynki odpowiadające dziurom w podpowłokach (3s, 3p) oraz 3d [11]. Dzięki temu otrzymano unikalne dane umożliwiające dokonanie oceny wiarygodności półklasycznego modelu SCA (SemiClassical Approximation) [11]. Interpretacja zarejestrowanych po raz pierwszy (przy użyciu spektrometru o wysokiej zdolności rozdzielczej typu von Hamos'a) szczegółów struktur satelitarnych linii rentgenowskich $L\alpha_{1,2}$ i $L\beta_1$ Mo i Pd indukowanych jonami tlenu pokazała, że zasadnicze cechy struktury linii $L\alpha_{1,2}$ i $L\beta_1$ dla Mo i Pd zostały poprawnie zreprodukowane [8]. Przy użyciu tego spektrometru zmierzono również widma rentgenowskie serii M toru indukowane jonami tlenu i neonu. Na zarejestrowanych widmach widoczne były szczegóły struktur satelitarnych dla linii $M\alpha_{1,2}$ i $M\beta_1$. Widma te zostały odtworzone przy pomocy przeprowadzonych przeze mnie obliczeń metodą MCDF [10]. Ponadto w latach 2003-2005 uczestniczyłam w badaniu zarejestrowanych (przy użyciu spektrometru o wysokiej zdolności rozdzielczej) widm rentgenowskich $K\alpha_{1,2}$ Zr, Nb, Mo i Pd indukowanych jonami węgla i tlenu, w których udało się zaobserwować dobrze odseparowane linie hipersatelitarne $K^h \alpha_{1.2}$ [13].

4.6.2. Badania niewchodzące w skład rozprawy doktorskiej (opublikowane przed jej złożeniem) [3,6,12,15]

W 2000 roku wykonałam szczegółowe badania teoretyczne metodą MCDF, których celem była interpretacja eksperymentalnych widm dla linii rentgenowskich serii K atomów tarcz Ta, Pb i Th indukowanych w zderzeniach z jonami He, C, O oraz Ne, zarejestrowanych w KVI w Groningen w Holandii [**3**]. Badania te pozwoliły na rozkład mierzonych widm na przyczynki od atomów tarcz i atomów produktów reakcji jądrowych, a w konsekwencji na uzyskanie wiarygodnych wartości prawdopodobieństw jonizacji powłoki L tych pierwiastków w rozpatrywanych zderzeniach [**3**].

W roku 2002 zastosowałam metodę klasycznych trajektorii Monte-Carlo (CTMC) do badania procesów zderzeń jonów siarki z atomami węgla [6]. W odróżnieniu od typowych obliczeń CTMC, które umożliwiają wyznaczanie tylko przekrojów czynnych na jonizację kulombowską wprost i wychwyt elektronu, w prowadzonych przeze mnie obliczeniach włączono dodatkowo możliwość kulombowskiego wzbudzenia elektronów z powłoki *K* (lub *L*) pocisku do jego wyższych powłok [6]. Wyznaczyłam wpływ parametrów rozpraszania (energii jonów siarki oraz ich początkowego ładunku) na wartości przekrojów czynnych na poszczególne procesy [6]. Uczestniczyłam również w zastosowaniu, do badań dynamiki zderzeń całkowicie odartych z elektronów jonów siarki z obojętnymi atomami wodoru, trzech półklasycznych podejść w ramach symulacji Monte-Carlo: metody Kirschbauma-Wiletsa, podejścia Cohena z ograniczeniem na energię oraz metody paczek falowych [15]. Dla energii pocisków (jonów siarki) z zakresu 2,5-120 MeV porównałam przekroje czynne na jonizację oraz przeniesienie elektronu otrzymane przy użyciu tych trzech metod.

Przeprowadziłam również analizę dynamiki produkcji i zaniku *K*-dziurowych frakcji jonów siarki wewnątrz folii węglowej [**12**], polegającą na interpretacji intensywności zarejestrowanych linii serii *K* w zależności od głębokości penetracji jonu siarki w folii. W widmach jonów siarki o energiach z zakresu 65–122 MeV występują linie odpowiadające przejściom satelitarnym i hipersatelitarnym, które świadczą o dynamicznym "współistnieniu" trzech rodzajów frakcji jonów, tj. jonów siarki bez dziury, z jedną dziurą i z dwiema dziurami w powłoce *K*. Dynamika tworzenia i zanikania tych frakcji została opisana, w ramach trójskładnikowego modelu sześcioma przekrojami czynnymi σ_{ii} (na zmianę liczby dziur w powłoce *K* z początkowej *i* na końcową *j*) [**12**].

4.6.3. Badania po doktoracie niewchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej

Oprócz cyklu artykułów [**H1-H14**], które przedstawiłam jako podstawę rozprawy habilitacyjnej, podjęłam również badania nad innymi interesującymi problemami, które krótko omówiłam poniżej.

4.6.3.1. Interpretacja widm rentgenowskich serii *K* towarzyszących hamowaniu ciężkich jonów w ciałach stałych o niskiej gęstości

W latach 2006-2010 dokonano interpretacji linii rentgenowskich Ka krzemu indukowanych jonami wapnia o energii 11.4MeV/u przechodzącymi przez aerożel SiO₂ o niskiej gęstości (d~0.0023 g/cm³) dla różnych etapów hamowania wiązki, rejestrowanych z dużą rozdzielczością energetyczną i przestrzenną w Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI), Darmstadt (Niemcy) [23, 43]. Zmierzone intensywności linii satelitarnych $K\alpha L^N$ krzemu zostały użyte do wyznaczenia rozkładu stanów dziurowych w powłoce L krzemu w chwili zderzenia jonów wapnia z atomami krzemu. Otrzymane wyniki wskazują na duży stopień jonizacji powłoki L w każdej z faz hamowania wiązki jonów w ośrodku aerożelu, szczególnie zaś w ostatniej fazie hamowania, kiedy prawdopodobieństwo jonizacji powłoki L sięga 70% [23]. Powyższe wyniki wskazują na fakt neutralizacji atomów krzemu na drodze wiązki jonów w chwili emisji promieniowania rentgenowskiego i w związku z tym tłumaczą brak deformacji struktury aerożelu powodowanej eksplozją kulombowską występująca na drodze wiązki. Stwierdzono [23], że efekty nanoplazmowe (takie jak efekt Dopplera) zachodzące w obszarze penetracji aerożelu przez wiązkę jonów odgrywają drugorzędną rolę w obniżaniu energii linii satelitarnych $K\alpha L^N$ krzemu. Pokazano także, że nanoplazmowy model relaksacji, bazujący na całkowitej jonizacji powłoki M krzemu, nie jest uzasadniony [23] we wszystkich rozważanych etapach hamowania jonów wapnia w aerożelu SiO₂.

4.6.3.2. Badania teoretyczne struktur różnorodnych linii rentgenowskich serii K, L i M wielu pierwiastków

W latach 2006-2013 kontynuowałam szczegółowe badania teoretyczne (metodą MCDF) struktur różnorodnych linii rentgenowskich serii K, L i M wielu pierwiastków. Wyznaczyłam m.in. wpływ jonizacji powłok L, M (i N) na struktury linii satelitarnych $K\alpha_{1,2}$, $K\beta_{1,3}$ i $K\beta_2$ w widmach rentgenowskich krzemu [49]. Dla kilku atomów ($40 \le Z \le 92$) zrealizowano systematyczne badania umożliwiające poznanie wpływu jonizacji powłok L, M, N (i O) na struktury teoretvczne różnorodnych linii serii L [17, 18, 21, 22, 35, 47, 48, 51] oraz serii M [19, 50], które wykazują znacznie większą złożoność niż linie satelitarne i hipersatelitarne serii K. Dla linii satelitarnych i hipersatelitarnych $L\alpha_{1,2}$ i $L\beta_1$ cyrkonu [47] i molibdenu wykonano rozległe badania teoretyczne, które uwzględniały w obliczeniach MCDF konfiguracje 2-, 3- i 4-dziurowe. W przypadku palladu przeprowadzono jeszcze bardziej zaawansowane obliczenia uwzględniające dodatkowo konfiguracje 5-dziurowe [17, 18, 21, 22, 35]. Zbadano również wpływ zmiany konfiguracji i jonizacji powłoki walencyjnej na kształty i parametry linii rentgenowskich $L\alpha_{1,2}$ i $L\beta_1$ dla molibdenu [51]. Aby umożliwić zbadanie zmian struktury linii rentgenowskich $M\alpha_{1,2}$ i $M\beta_1$ ciężkich atomów w wyniku jonizacji poszczególnych podpowłok powłok M, N i O, wykonano dla Au [50], Th [50] i U [33] systematyczne obliczenia dla linii diagramowych, satelitarnych i hipersatelitarnych.

W pracy [20] przedstawiono zarejestrowane z wysoką zdolnością rozdzielczą bardzo trudne do obserwacji przejścia Coster-Kronig'a $L_3-M_{4,5}$ i L_2-M_4 dla palladu (Z=46) indukowane przy użyciu promieniowania synchrotronowego. Poprawna interpretacja zarejestrowanych widm została dokonana dzięki przeprowadzonej przeze mnie identyfikacji poszczególnych struktur satelitarnych, polegającej na porównaniu ich położeń z wynikami precyzyjnych relatywistycznych obliczeń wykonanych przy użyciu metody MCDF [20]. Kolejnym realizowanym zagadnieniem było określenie całkowitych średnich stanów ładunkowych oraz jonizacji poszczególnych powłok K, L i M dla pocisków (jonów siarki o energiach 9.6, 16, 22.4 i 32 oraz 65, 79, 99 i 122 MeV) przechodzących przez tarcze: węglową, glinową, tytanową i żelazową [**24**, **25**]. W tym celu zaproponowano nowatorskie, ilościowe podejście teoretyczne (wykorzystujące wyniki szczegółowych obliczeń metodą MCDF), które bazuje na analizie zmierzonych widm rentgenowskich dla linii serii K diagramowych, satelitarnych i hipersatelitarnych pochodzących od pocisków, tj. jonów siarki [**24**, **25**].

4.6.3.3. Inne badania dotyczące parametrów plazmy generowanej w różnych urządzeniach

W artykule [32] przedstawiono wyniki teoretycznych badań metodą MCDF dotyczących wpływu obdzierania elektronów zewnętrznych podpowłok na położenia linii $K\alpha_{1,2}$ irydu. Eksperymentalne wartości przesunięć energetycznych linii K α_2 irydu w stanie plazmy wytwarzanej przy użyciu diody PFRP zostały wyznaczone z użyciem filtra, tzw. K - edge filter. Okazało się [32], że wartości zmierzone odpowiadają stopniowi jonizacji irydu w maksimum ($q \sim 16-17$). Na podstawie tych informacji wyznaczono temperaturę elektronową plazmy irydowej (~ 60 eV) przy użyciu modelu FLYCHK [32]. Wyniki szczegółowej analizy przesunięć energetycznych dla linii rentgenowskich serii K (tj. $K\alpha$ i $K\beta_1$) molibdenu zostały uzyskane przy użyciu metody MCDF, co zaprezentowano w artykule [44]. Wykazano liniową zależność energii tych linii wraz z liczbą elektronów zrywanych z zewnętrznych powłok, której nachylenie zmienia się wraz z rodzajem podpowłok z których usuwane są elektrony. Należy dodać, że uzyskane wyniki pozwalają na otrzymanie wiarygodnych informacji o stopniu jonizacji plazmy [44]. Ostatnio wyniki modelowania struktur linii rentgenowskich serii M wolframu oraz serii L molibdenu w stanie plazmy przy użyciu pakietu FAC w ramach modelu CR zostały przedstawione w artykule [52]. Pokazano w nim między innymi bardzo szczegółową analizę kształtów linii rentgenowskich serii M dla jonów wolframu (od W^{44+} do W^{47+}) oraz serii L dla jonów molibdenu (od Mo^{30+} do Mo^{35+}), które wyznaczone zostały dla różnych stopni jonizacji przy temperaturze 4.5 keV i gęstości elektronowej plazmy wynoszącej 6×10^{13} cm⁻³. Stwierdzono, że w badanym zakresie (5.0-5.35 Å) największy przyczynek do struktury linii rentgenowskich serii M dla wolframu wnoszą jony W^{46+} , natomiast dla molibdenu przyczynki do przejść $3s \rightarrow 2p$ pochodzące od jonu Mo³²⁺ stanowią największy wkład do przewidywanego widma [52]. Otrzymane wyniki mogą być pomocne w opracowaniu diagnostyki parametrów plazmy w reaktorach termojadrowych typu tokamak [45, 46].

Referencje do sekcji 4.6.

1. **K. Słabkowska**, F. Pawłowski, and M. Polasik, "Effect of *L*- and *M*-shell ionization on the *K* x-ray spectra parameters of sulphur", Acta Phys. Polon. B **31**, 507-510 (2000).

2. U. Majewska, J. Braziewicz, D. Banaś, M. Jaskóła, T. Czyżewski, W. Kretschmer, **K. Słabkowska**, F. Pawłowski, and M. Polasik, "Interpretation of K x-ray spectra from highly ionized sulphur projectiles passing through thin carbon foils", Acta Phys. Polon. B **31**, 511-516 (2000).

3. V.L. Kravchuk, A.M. van den Berg, F. Fleurot, M.A. de Huu, H. Lohner, H.W. Wilschut, M. Polasik, M. Lewandowska-Robak, and **K. Słabkowska**, "*K*- and *L*-shell ionization of heavy targets by various 20 and 80 MeV/u projectiles", Phys. Rev. A **64**, 062710-1-6 (2001).

4. J. Rzadkiewicz, D. Chmielewska, Z. Sujkowski, M. Berset, J.-Cl. Dousse, Y.-P. Maillard, O. Mauron, P.-A. Raboud, J. Hoszowska, **K. Słabkowska**, M. Polasik, and M. Pajek, "Effect of *L*- and *M*-subshell ionization on the K x-ray diagram and hypersatellite lines of cadmium", Acta Phys. Polon. B **33**, 415-424 (2002).

5. U. Majewska, **K. Słabkowska**, M. Polasik, J. Braziewicz, D. Banaś, S. Chojnacki, T. Czyżewski, I. Fijał, M. Jaskóła, and A. Korman, "Configurations of highly ionized fast sulphur projectiles passing through a carbon foil evaluated from low resolution K x-ray spectra", J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, 1941-1957 (2002).

6. **K. Słabkowska**, M. Polasik, and M. Janowicz, "Scattering of sulphur ions by carbon – classical-trajectory Monte Carlo results", Phys. Rev. A **67**, 012713-1-10 (2003).

7. K. Słabkowska and M. Polasik,

"Effect of L- and M-shell ionization on the shapes and parameters of the *K* x-ray spectra of sulphur", Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **205**, 123-127 (2003).

8. M. Czarnota, M. Pajek, D. Banaś, D. Chmielewska, J. Rzadkiewicz, Z. Sujkowski, J.-Cl. Dousse, M. Berset, O. Mauron, Y.-P. Maillard, P.A. Raboud, J. Hoszowska, M. Polasik, and **K. Słabkowska**, "Observation of *L*-X-ray satellites and hypersatellites in collisions of O and Ne ions with Mo and Pd", Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **205**, 133-138 (2003).

9. U. Majewska, J. Braziewicz, M. Polasik, **K. Słabkowska**, I. Fijał, M. Jaskóła, A. Korman, S. Chojnacki, W. Kretschmer, "Highly excited states of sulphur projectiles inside a carbon target", Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **205**, 799-807 (2003).

10. M. Czarnota, M. Pajek, D. Banaś, J.-Cl. Dousse, M. Berset, O. Mauron, Y.-P. Maillard, P.A. Raboud, D. Chmielewska, J. Rzadkiewicz, Z. Sujkowski, J. Hoszowska, M. Polasik, and **K. Słabkowska**, "The study of Th *M*-x-ray satellites and hypersatellites induced by energetic O and Ne ions", Radiat. Phys. Chem. **68**, 121-125 (2003).

11. Rzadkiewicz, D. Chmielewska, Z. Sujkowski, J.-Cl. Dousse, D. Castella, D. Corminboeuf, J. Hoszowska, P.A. Raboud, M. Polasik, **K. Słabkowska**, and M. Pajek, "High-resolution study of the $K\beta_2$ x-ray spectra of mid-Z atoms bombarded with 20 MeV/anu ¹²C ions", Phys. Rev. A **68**, 032713-1-14 (2003).

12. J. Braziewicz, U. Majewska, **K. Słabkowska**, M. Polasik, I. Fijał, M. Jaskóła, A. Korman, W. Czarnacki, S. Chojnacki, and W. Kretschmer, "Dynamics of formation of *K*-hole fractions of sulphur projectiles inside a carbon foil", Phys. Rev. A **69**, 0627105-1-10 (2004).

13. J. Rzadkiewicz, D. Chmielewska, A. Gójska, Z. Sujkowski, M. Berset, J-Cl. Dousse, Y.-P. Maillard, O. Mauron, P.-A. Raboud, M. Polasik, **K. Słabkowska**, J. Hoszowska, M. Pajek, "Natural widths of hypersatellite *K* X-ray spectra and lifetimes of double *K*-hole states in mid-Z atoms," Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **235**, 110-115 (2005).

14. **K. Słabkowska**, M. Polasik, J. Rzadkiewicz, "Systematic Dirac-Fock method study of the x-ray spectra accompanying the ionization in collision processes: The structure of the $K\beta_2 L^0 M^r$ lines", Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. B **235**, 240-244 (2005).

15. M. Janowicz, **K. Słabkowska**, P. Matuszak, M. Polasik, "Semi-classical approaches to ion-atom scattering", Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **235**, 337-341 (2005).

16. J. Braziewicz, U. Majewska, M. Polasik, **K. Słabkowska**, I. Fijal, M. Jaskóła, A. Korman, S. Chojancki, W. Kretschmer, "Sulphur ion charge states inside solids from low resolution *K* X-ray spectra", Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **235**, 403-407 (2005).

17. M. Czarnota, M. Pajek, D. Banaś, J.-Cl. Dousse, Y.-P. Maillard, O. Mauron, P.A. Raboud, M. Berset, D. Chmielewska, J. Rzadkiewicz, Z. Sujkowski, J. Hoszowska, **K. Słabkowska**, and M. Polasik, "Multiple ionization effects in x-ray emission induced by heavy ions", Braz. J. Phys. **36**, 546-549 (2006).

18. **K. Słabkowska**, M. Polasik, "Structure of L-X-ray satellite and hypersatellite lines of palladium", Radiat. Phys. Chem. **75**, 1471–1476 (2006).

19. M. Polasik, **K. Słabkowska**, "Structure of M-X-ray satellite and hypersatellite lines of thorium", Radiat. Phys. Chem. **75**, 1497–1502 (2006).

20. W. Cao, J. Hoszowska, J.-Cl. Dousse, and Y. Kayser, M. Kavčič, M. Žitnik, K. Bučar, and A. Mihelič, J. Szlachetko, **K. Słabkowska**, "*L*-subshell Coster-Kronig yields of palladium determined via synchrotron-radiation-based high-resolution x-ray spectroscopy", Phys. Rev. A **80**, 012512 (2009).

21. M. Czarnota, D. Banaś, M. Breset, D. Chmielewska, J.-Cl. Dousse, J. Hoszowska, Y.-P. Maillard, O. Mauron, M. Pajek, M. Polasik, P. A. Raboud, J. Rzadkiewicz, **K. Słabkowska**, Z. Sujkowski, "High-resolution X-ray study of the multiple ionization of Pd atoms by fast oxygen ions", Eur. Phys. J. D **57**, 321–324 (2010).

22. M. Czarnota, D. Banaś, M. Breset, D. Chmielewska, J.-Cl. Dousse, J. Hoszowska, Y.-P. Maillard, O. Mauron, M. Pajek, M. Polasik, P.A. Raboud, J. Rzadkiewicz, **K. Słabkowska**, and Z. Sujkowski, "Observation of internal structure of the *L*-shell x-ray hypersatellites for palladium atoms multiply ionized by fast oxygen ions", Phys. Rev. A **81**, 064702-1-4 (2010).

23. J. Rzadkiewicz, A. Gójska, O. Rosmej, M. Polasik, **K. Słabkowska**, "Interpretation of the Si $K\alpha$ x-ray spectra accompanying the stopping of swift Ca ions in low density SiO₂ aerogel", Phys. Rev. A **82**, 012703-1-14 (2010).

24. J. Braziewicz, M. Polasik, **K. Słabkowska**, U. Majewska, D. Banaś, M. Jaskóła, A. Korman, K. Kozioł, W. Kretschmer, "Equilibrium *K*-, *L*- and *M*-shell ionizations and charge state distribution of sulphur projectiles passing through solid targets", Phys. Rev. A **82**, 022709-1-14 (2010).

25. K. Słabkowska, M. Polasik, J. Braziewicz, K. Kozioł, D. Banaś, M. Jaskóła, A. Korman, W. Kretschmer,

"Equilibrium degree of K-, L- and M-shell ionizations of sulphur projectiles passing through solid target", Phys. Scr. T144, 014018-1-3 (2011).

26. M. Polasik, **K. Słabkowska**, K. Kozioł, J. Starosta, J-Cl. Dousse, J. Hoszowska, J. Rzadkiewicz, "Lifetimes of doubly *K*-shell ionized states", Phys. Scr. T**144**, 014021-1-3 (2011).

27. M. Polasik, **K. Słabkowska**, J. Rzadkiewicz, K. Kozioł, J. Starosta, E. Wiatrowska-Kozioł, J.-Cl. Dousse, J. Hoszowska, " $K^h \alpha_{1,2}$ X-ray Hypersatellite Line Broadening as a Signature of K-Shell Double Photoionization Followed by Outer-Shell Ionization and Excitation", Phys. Rev. Lett. **107**, 073001-1-5 (2011).

28. N. R. Pereira, B. V. Weber, D. G. Phipps, J. W. Schumer, J. F. Seely, J. J. Carroll, J. R. Vanhoy, **K. Słabkowska**, M. Polasik, "Near-coincident *K*-line and *K*-edge energies as ionization diagnostics for some high atomic number plasmas", Phys. Plasmas **19**, 102705 (2012).

29. N. R. Pereira, B. V. Weber, D. G. Phipps, J. W. Schumer, J. F. Seely, J. J. Carroll, J. R. VanHoy, **K. Słabkowska**, M. Polasik, "10 eV ionization shift in Ir $K\alpha_2$ from a near-coincident Lu *K*-edge", Rev. Sci. Instrum. **83**, 10E110 (2012).

30. **K. Słabkowska**, "Influence of multiple outer-shell electron stripping on the $L\alpha$, $L\beta$ and $L\gamma$ x-ray energies of tungsten", Phys. Scr. T**156**, 014080 (2013).

31. J. F. Seely, B. V. Weber, D. G. Phipps, N. R. Pereira, D. Mosher, **K. Słabkowska**, M. Polasik, J. Starosta, J. Rzadkiewicz, S. Hansen, U. Feldman, L. T. Hudson, J. W. Schumer, "Tungsten *L* transition line shapes and energy shifts resulting from ionization in warm dense matter", High Energy Density Phys. **9**, 354-362 (2013).

32. J. Rzadkiewicz, **K. Słabkowska**, M. Polasik, J. Starosta, E. Szymańska, K. Kozioł, M. Scholz, N.R. Pereira, "Influence of multiple outer-shell electron stripping on the $K\alpha$ and $K\beta$ x-ray energies of iridium", Phys. Scr. T**156**, 014083 (2013).

33. J. Starosta, M. Polasik, **K.Słabkowska**, "Theoretical structures of the satellite and hypersatellite *M*-x-ray lines of uranium", Phys. Scr. **T156**, 014021 (2013).

34. N.R. Pereira, B.V. Weber, D.G. Phipps, J.W. Schumer, J.F. Seely, J.J. Carroll, J.R. Vanhoy, **K. Słabkowska**, M. Polasik, E. Szymańska, J. Rzadkiewicz, "High-resolution (~0.05%) red shift of a ~ 60 keV $K\beta$ line upon ionization", High Energy Density Phys. **9**, 500–504 (2013).

35. M. Czarnota, D. Banaś, M. Berset, D. Chmielewska, J.-Cl. Dousse, J. Hoszowska, Y.-P. Maillard, O. Mauron, M. Pajek, M. Polasik, P. A. Raboud, J. Rzadkiewicz, **K. Słabkowska**, Z. Sujkowski, "Satellite and hypersatellite structures of $L\alpha_{1,2}$ and $L\beta_1$ x-ray transitions in mid-Z atoms multiply ionized by fast oxygen ions", Phys. Rev. A **88**, 052505 (2013).

36. **Słabkowska**, E. Szymańska, M. Polasik, N.R. Pereira, J. Rzadkiewicz, J.F. Seely, B.V. Weber, J.W. Schumer, "Ionization energy shift of characteristic K x-ray lines from high-Z materials for plasma diagnostics", Phys. Plasmas **21**, 031216 (2014).

37. **K. Słabkowska**, E. Szymańska, J. Starosta, M. Polasik, N.R. Pereira, J. Rzadkiewicz, M. Kubkowska, A. Czarnecka, "Diagnostics of plasma based on *K*, *L* and *M* x-ray line positions", Phys. Scr. T161, 014033 (2014);

38. **K. Słabkowska**, M. Polasik, E. Szymańska, J. Starosta, Ł. Syrocki, J. Rzadkiewicz, N.R. Pereira, "Modeling of the L and M x-ray line structures for tungsten in high-temperature tokamak plasmas", Phys. Scr. T161, 014015 (2014);

39. K. Słabkowska, E. Szymańska, N. R. Pereira, Ł. Syrocki, J. Rzadkiewicz, M. Polasik, "*K* x-ray line energies as diagnostics of warm dense plasma", High Energy Density Phys. 14, 30-32 (2015).

40. **K. Słabkowska**, Ł. Syrocki, E. Szymańska, J. Rzadkiewicz, G. Pestka, M. Polasik, "Modeling of the *K* and *L* x-ray line structures for molybdenum ions in warm dense Z-pinch plasma", High Energy Density Phys. **14**, 44-46 (2015).

41. **K. Słabkowska**, E. Szymańska, Ł. Syrocki, J. Rzadkiewicz, M. Polasik, "The *K* x-ray line structures for a warm dense copper plasma", High Energy Density Phys. **15**, 8-11 (2015).

42. **K. Słabkowska**, J. Rzadkiewicz, Ł. Syrocki, E. Szymańska, A. Shumack, M. Polasik, N. R. Pereira, and JET contributors, "On the interpretation of high-resolution x-ray spectra from JET with an ITER-like wall", Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **48**, 144028-1-7 (2015).

43. J. Rzadkiewicz, O. Rosmej, A. Blazevic, V.P. Efremov, A. Gójska, D.H.H. Hoffmann, S. Korostiy, M. Polasik, **K. Słabkowska**, and A. E. Volkov, "Studies of the $K\alpha$ x-ray spectra of low-density SiO₂ aerogel induced by Ca projectiles for different penetration depths", High Energy Density Physics **3**, 233-236 (2007).

44. **K. Słabkowska**, J. Rzadkiewicz, E. Szymańska, Ł. Syrocki, M. Polasik, and N. R. Pereira, "Energy shifts of *K*- and L-lines as spectroscopic diagnostic of Z-pinch plasmas", AIP Conference Proceedings **1639**, 47 (2014).

45. F. Romanelli, Laxaback M., I. Abel et al. "Overview of JET results", Nucl. Fusion 51, 094008 (2011)

46. F. Romanelli, I. Abel, V. Afanesyev et al. "Overview of the JET results with the ITER-like wall", Nucl. Fusion **53**, 104002 (2013)

47. K. Słabkowska, M. Polasik, "Theoretical multiconfiguration Dirac-Fock method study of the structure of *L*-X-ray satellite and hypersatellite lines of zirconium", J. Phys.: Conf. Ser. 58, 263-266 (2007).

48. M. Czarnota, M. Pajek, D. Banaś, J-Cl. Dousse, Y-P. Maillard, O. Mauron, P.A. Raboud, M. Berset, J. Hoszowska, K. Słabkowska, M. Polasik, D. Chmielewska, J. Rzadkiewicz, and Z. Sujkowski, "Vacancy rearrangement processes in multiply ionized atoms", J. Phys.: Conf. Ser. 58, 295-298 (2007).

49. K. Słabkowska, M. Polasik, "Systematic multiconfiguration Dirac-Fock method study of the *K*-X-ray spectra of silicon", J. Phys.: Conf. Ser. 163, 012040 (2009).

50. P. Matuszak, K. Kozioł, M. Polasik, **K. Słabkowska**, "Theoretical predictions of the structure of *M*-X-ray lines of heavy atoms, J. Phys.: Conf. Ser. **163**, 012049 (2009).

51. M. Polasik, K. Kozioł, **K. Słabkowska**, M. Czarnota, M. Pajek, "Influence of changes in the valence electronic configuration on the structure of *L*-X-ray spectra of molybdenum", J. Phys.: Conf. Ser. **163**, 012050 (2009).

52. **K. Słabkowska**, M. Polasik, Ł. Syrocki, E Szymańska, J. Rzadkiewicz, N.R. Pereira, "Modeling of the M X-ray line structures for tungsten and L X-ray line structures for molybdenum", Journal of Physics: Conference Series **583**, 012031 (2015).

Adtersyne Steldhoushe