

Математическое моделирование спектра неравновесной лазерной плазмы

В.И.Мажукин, М.Г.Никифоров, К.Фьеве

Предложен метод расчета спектра неравновесной лазерной плазмы, базирующийся на неравновесной столкновительно-радиационной модели, включающей в себя основные механизмы уширения линий (естественное, под влиянием давления, доплеровское и квадратичный эффект Штарка) и дополненной уравнениями баланса энергии электронов и ионов. Неравновесные населенности основных и возбужденных состояний нейтральных атомов и ионов для произвольного момента времени находятся из решения уравнений кинетики. Форма каждой спектральной линии определяется центральным ядром, рассчитанным в ударном приближении до частотной границы применимости ударного уширения, где производится «склейка» ядра с крыльями, рассчитанными из квазистатического приближения. Обоснованием адекватности предлагаемой теоретической модели послужили результаты моделирования ряда экспериментов по исследованию спектров излучения в условиях локального термодинамического равновесия. Сравнение результатов показало хорошее совпадение данных вычислительного и натурального экспериментов для линий основного состояния первого иона углерода и нейтральных атомов гелия и аргона. Выполнен расчет неравновесного спектра оптического пробоя аргона. Математическое моделирование показало, что интенсивности неравновесных линейчатых спектров могут быть заметно (в несколько раз) меньше интенсивностей равновесных.

Ключевые слова: неравновесная лазерная плазма, линейчатый спектр, механизмы уширения, кинетическая модель.

1. Введение

Важную роль в методах диагностики плазмы играет спектроскопия, применение которой позволяет изучать и анализировать процессы, происходящие в плазме, определять ее температуру, зарядовый состав и концентрации частиц. Существуют различные спектроскопические способы измерения температуры плазмы, например метод распределения яркости в континууме [1], метод сравнения яркостей двух континуумов [2], метод относительных интенсивностей спектральных линий [3], определение температуры по контуру спектральной линии [4].

Однако все указанные методы имеют ограниченную область применения. Во-первых, в них используется предположение о локальном термодинамическом равновесии, что требует дополнительного обоснования их применения для неравновесных процессов. Обычно первый и второй методы [1, 2] используются при достаточно высоких температурах, когда высока интенсивность тормозного и рекомбинационного спектров излучения. Третий метод предполагает наличие в плазме Саха-Больцмановского равновесия, а четвертый требует отсутствия самопоглощения в линии, что существенно ограничивает область его применения.

Таким образом, ни один из указанных методов не является универсальным для диагностики плазмы. Сравне-

ние характеристик плазмы, полученных в ходе эксперимента, с результатами математического моделирования наиболее удачно дополняет известные методы ее диагностики. Для этих целей была разработана неравновесная столкновительно-радиационная кинетическая модель, описывающая взаимодействие излучения с веществом и дополненная различными механизмами уширения спектральных линий.

2. Неравновесная столкновительно-радиационная кинетическая модель

2.1. Кинетика заселения и ионизации

В газовой среде, взаимодействующей с лазерным излучением, происходит большое число различных элементарных реакций, совокупность которых определяет характер макропроцесса. Построение модели и последующие расчеты по ней проводились при следующих предположениях:

- рассматривается атомарная плазма одного химического элемента;
- в исходном состоянии вещество находится в состоянии полного термодинамического равновесия;
- плазма однородна по пространству, т. е. ее температура и плотность не меняются по пространству.

Столкновительно-радиационная кинетическая модель включает в себя большое число возбужденных состояний излучающих атомов и ионов. Каждому уровню соответствует свое обыкновенное дифференциальное уравнение, которое описывает баланс приходящих и уходящих на него частиц за счет элементарных микропроцессов. В реализованную столкновительно-радиационную модель входят десять элементарных процессов (реакций), которые представлены в табл.1.

В.И.Мажукин, М.Г.Никифоров. Институт математического моделирования РАН, Россия, 125047 Москва, Миусская пл., 4а;
e-mail: immgras@orc.ru
Ch.Fieviet. Schneider Electric, Research Centre A2, 38050 Grenoble Cedex, France

Поступила в редакцию 19 мая 2005 г., после доработки – 27 октября 2005 г.

Табл.1.

Номер процесса	Элементарный процесс	Частота (вероятность) процесса (с ⁻¹)	Скорость процесса
1	Спонтанный распад $N_n^z \xrightarrow{A_{nm}^z} N_m^z + \hbar\omega_{nm}^z$	A_{nm}^z	
2	Столкновительное возбуждение/девозбуждение $N_m^z + e \xrightarrow[\frac{r_{nm}^z}{k_{nm}^z}]{} N_n^z + e$	k_{nm}^z, r_{nm}^z (см ³ ·с ⁻¹)	
3	Ионизация электронным ударом $N_m^z + e \xrightarrow{\alpha_m^z} N_0^{z+1} + 2e$	α_m^z (см ³ ·с ⁻¹)	
4	Трехчастичная рекомбинация $N_0^{z+1} + 2e \xrightarrow{\beta_m^z} N_m^z + e$	β_m^z (см ⁶ ·с ⁻¹)	
5	Фотоионизация лазером $N_m^z + \hbar\omega_\lambda \xrightarrow{\lambda v_m^z} N_0^{z+1} + e$	λv_m^z	
6	Фоторекомбинация в поле излучения лазера $N_0^{z+1} + e + \hbar\omega_\lambda \xrightarrow{\lambda R_m^z} N_m^z + \hbar\omega$	λR_m^z (см ³ ·с ⁻¹)	
7	Фотоионизация излучением непрерывного спектра $N_m^z + \hbar\omega_c \xrightarrow{c v_m^z} N_0^{z+1} + e$	$c v_m^z$	
8	Фоторекомбинация в поле непрерывного излучения $N_0^{z+1} + e + \hbar\omega_c \xrightarrow{c R_m^z} N_m^z + \hbar\omega_c$	$c R_m^z$ (см ³ ·с ⁻¹)	
9	Фотовозбуждение лазером $N_m^z + \hbar\omega_\lambda \xrightarrow{\lambda v_{mm}^z} N_n^z$	λv_{mm}^z	
10	Фотовозбуждение непрерывным излучением $N_m^z + \hbar\omega_c \xrightarrow{c v_{mm}^z} N_n^z$	$c v_{mm}^z$	

Примечания: N_n^z – ион с зарядом z , находящийся в состоянии n ; $\hbar\omega_{nm}^z$ – энергия $m-n$ -перехода; $\hbar\omega_\lambda$ – квант энергии лазерного излучения; $\hbar\omega_c$ – квант энергии непрерывного излучения; A_{nm}^z – вероятность спонтанного распада возбужденного состояния n в состояние m ; k_{nm}^z и r_{nm}^z – скорости возбуждения и девозбуждения иона N_m^z электронным ударом; α_m^z – ионизация иона N_m^z из m -го состояния электронным ударом; β_m^z – коэффициент трехчастичной рекомбинации иона N_m^z ; λv_m^z и $c v_m^z$ – частоты фотоионизации иона N_m^z в поле лазерного и континуального излучения; λR_m^z и $c R_m^z$ – коэффициенты фоторекомбинации иона N_0^{z+1} в поле лазерного и континуального излучения; λv_{mm}^z и $c v_{mm}^z$ – частоты фотовозбуждения иона N_m^z лазерным и континуальным излучением.

С учетом данных о характерных скоростях процессов система уравнений кинетики для основных и возбужденных состояний нейтральных атомов и ионов запишется в следующем виде:

$$\frac{dN_0^0}{dt} = - \sum_{j=1}^{M_0} (k_{0j}^0 N_0^0 - r_{j0}^0 N_j^0) N_e - (\alpha_0^0 N_0^0 - \beta_0^0 N_0^1 N_e) N_e + \sum_{j=1}^{M_0} A_{j0}^0 N_j^0 - \sum_{j=1}^{M_0} c v_{0j}^0 \left(N_0^0 - \frac{g_0}{g_j} N_j^0 \right) -$$

$$- \sum_{j=1}^{M_0} \lambda v_{0j}^0 \left(N_0^0 - \frac{g_0}{g_j} N_j^0 \right) - (\lambda v_0^0 + c v_0^0) N_0^0 + (c R_0^0 + \lambda R_0^0) N_0^1 N_e \quad (1)$$

для основного состояния нейтральных атомов ($z = 0$),

$$\begin{aligned} \frac{dN_0^z}{dt} = & - \sum_{j=1}^{M_z} (k_{0j}^z N_0^z - r_{j0}^z N_j^z) N_e + \sum_{j=0}^{M_{z-1}} (\alpha_j^{z-1} N_j^{z-1} - \beta_j^{z-1} N_0^z N_e) N_e - (\alpha_0^z N_0^z - \beta_0^z N_0^{z+1} N_e) N_e \\ & + \sum_{j=1}^{M_z} A_{j0}^z N_j^z - \sum_{j=1}^{M_z} c v_{0j}^z \left(N_0^z - \frac{g_0^z}{g_j^z} N_j^z \right) - \sum_{j=1}^{M_z} \lambda v_{0j}^z \left(N_0^z - \frac{g_0^z}{g_j^z} N_j^z \right) - (c v_0^z + \lambda v_0^z) N_0^z \\ & + (c R_0^z + \lambda R_0^z) N_0^{z+1} N_e + \sum_{n=0}^{M_{z-1}} (c v_n^{z-1} + \lambda v_n^{z-1}) N_n^{z-1} - \sum_{n=0}^{M_z} (c R_n^{z-1} + \lambda R_n^{z-1}) N_0^z \end{aligned} \quad (2)$$

для основного состояния ионов с зарядом $z \in (1, 2, \dots, z_{\max} - 1)$,

$$\begin{aligned} \frac{dN_m^z}{dt} = & \sum_{j=0}^{m-1} (k_{jm}^z N_j^z - r_{mj}^z N_m^z) N_e - \sum_{j=m+1}^{M_z} (k_{mj}^z N_m^z - r_{jm}^z N_j^z) N_e - (\alpha_m^z N_m^z - \beta_m^z N_0^{z+1} N_e) N_e + \sum_{j<m}^{M_z} c v_{jm}^z \left(N_j^z - \frac{g_j^z}{g_m^z} N_m^z \right) \\ & - \sum_{j>m}^{M_z} c v_{mj}^z \left(N_m^z - \frac{g_m^z}{g_j^z} N_j^z \right) + \sum_{j<m}^{M_z} \lambda v_{jm}^z \left(N_j^z - \frac{g_j^z}{g_m^z} N_m^z \right) - \sum_{j>m}^{M_z} \lambda v_{mj}^z \left(N_m^z - \frac{g_m^z}{g_j^z} N_j^z \right) - \sum_{j=0}^{m-1} A_{mj}^z N_m^z + \sum_{j=m+1}^{M_z} A_{jm}^z N_j^z - \\ & - (c v_m^z + \lambda v_m^z) N_m^z + (c R_m^z + \lambda R_m^z) N_0^{z+1} N \end{aligned} \quad (3)$$

для возбужденных состояний нейтральных атомов и ионов ($m = 1, 2, \dots, M_z, z = 0, 1, 2, \dots, z_{\max} - 1$),

$$\begin{aligned} \frac{dN_0^{z^*}}{dt} = & \sum_{j=0}^{M_{z^*-1}} (\alpha_j^{z^*-1} N_j^{z^*-1} - \beta_j^{z^*-1} N_0^{z^*} N_e) N_e + \sum_{n=1}^{M_{z^*-1}} [(c v_n^{z^*-1} + \lambda v_n^{z^*-1}) N_n^{z^*-1} - (c R_n^{z^*-1} + \lambda R_n^{z^*-1})] N_0^{z^*} N_e \end{aligned} \quad (4)$$

для концентрации ионов с зарядом $z = z^* = z_{\max}$,

$$\frac{dN_e}{dt} = \sum_{z=1}^{z_{\max}} \sum_{m=0}^{M_z} \frac{dN_m^z}{dt} \quad (5)$$

для концентраций электронов. Здесь N_m^z – плотность ионов в состоянии m с зарядом z ; g_m^z – статистический вес; N_e – плотность свободных электронов; M_z – число включенных в модель возбужденных состояний иона с зарядом z ; z_{\max} – максимальная степень ионизации нейтрального атома. Ион с максимальной степенью ионизации считается бесструктурным, т.е. его возбужденные состояния не учитываются.

2.2. Энергетический баланс

Воздействие внешнего электромагнитного поля излучения выводит поглощающую среду (частично ионизованный газ, плазма) из состояния равновесия. Процессы кинетики возбуждения, ионизации, рекомбинации и фотоявления стремятся привести состояние поглощающей среды в соответствие с внешним источником энергии, т. е. установить новое равновесие. С учетом того, что характерные времена релаксации рассматриваемых кинетических процессов существенно (на несколько порядков) различаются между собой, систему уравнений кинетики традиционно относят к так называемым жестким системам. Релаксация плазмы в целом происходит сложным образом и определяется временем наиболее медленного процесса. В плазме или частично ионизованном газе могут существовать три энергетические подсистемы, внутри которых локальное равновесие устанавливается намного быстрее, чем обмен энергией между ними. Это подсистемы, свойства которых определяются поступательной энергией электронов, поступательной энергией атомов и ионов и суммарной внутренней энергией возбужденных атомов и ионов. Последняя зависит от плотности электронов, атомов и ионов и обычно в явном виде в уравнениях не выделяется.

Баланс энергии поступательных степеней свободы описывается двумя уравнениями для энергии с общим обменным членом. Из их совместного решения находят температуры электронов и ионов T_e и T_i . Механизм передачи энергии электромагнитного поля свободным электронам существенно зависит от длины волны лазерного излучения. В ИК диапазоне баланс энергии электронов определяется набором энергии в электромагнитном поле при упругих столкновениях электрона с атомами и ионами (обратный тормозной эффект) и пополняется энергией, выделяющейся в реакциях девозбуждения и рекомбинации.

С ростом частоты излучения в видимой и УФ областях, где энергия кванта лазерного излучения становится сравнимой с энергией ионизации возбужденных состояний, влияние обратного тормозного эффекта быстро уменьшается и основную роль в энергетическом балансе свободных электронов начинают играть фотопроцессы. Потери энергии в электронной подсистеме обусловлены, в основном, неупругими процессами: электронным возбуждением, ионизацией, а также квазиупругими столкновениями, характеризующимися передачей доли энергии атомам и ионам. Поступательная энергия атомов и ионов полностью определяется обменом энергии с электронной подсистемой.

Уравнения для энергии поступательных степеней свободы электронов и тяжелых частиц записываются в следующем виде [5, 6]:

$$\frac{3}{2} \frac{d(N_e T_e)}{dt} = \left[\mu G - \frac{3}{2} \delta (T_e - T_i) \right] (v_{en} + v_{ei}) N_e - \sum_{z=0}^{z^*-1} \sum_{m=0}^{M_z} Q_{mJ}^z - \sum_{z=0}^{z^*-1} \sum_{m=0}^{M_{z-1}} Q_{m\Delta E}^z + \sum_{z=0}^{z^*-1} Q_{m\Phi}^z, \quad (6)$$

$$\frac{3}{2} \frac{d(N_i T_i)}{dt} = \frac{3}{2} \delta (T_e - T_i) (v_{en} + v_{ei}) N_e, \quad (7)$$

где

$$\mu = \frac{4\pi e^2}{m_e c [\omega^2 + (v_{en} + v_{ei})^2]}; \quad \delta = \frac{2m_e}{M_a}; \quad N_i = \sum_{z=0}^{z_{\max}} \sum_{m=0}^{M_z} N_m^z;$$

$$Q_{m\Delta E}^z = \sum_{j=m+1}^{M_z} E_{jm}^z (k_{mj}^z N_m^z - r_{jm}^z N_j) N_e;$$

$$Q_{mJ}^z = J_m^z (\alpha_m^z N_m^z - \beta_m^z N_0^{z+1} N_e) N_e;$$

$$Q_{m\Phi}^z = \sum_{m=0}^{M_z} [(\hbar\omega_\lambda - J_m^z) (\lambda v_m^z N_m^z - \lambda R_m^z N_e N_0^{z+1}) + (\hbar\omega_c - J_m^z) (c v_m^z N_m^z - c R_m^z N_e N_0^{z+1})];$$

G – интенсивность лазерного излучения; v_{en} и v_{ei} – частоты электрон-нейтральных и электрон-ионных столкновений; $Q_{m\Delta E}^z$, Q_{mJ}^z и $Q_{m\Phi}^z$ – удельные мощности, характеризующие обмен энергией за счет неупругих столкновений, ионизации – рекомбинации и фотоионизации – фоторекомбинации соответственно; N_i – концентрация ионов; e – заряд электрона; m_e – масса электрона; M_a – масса атома; E_{jm}^z – энергия перехода между уровнями j и m иона с зарядом z ; J_m^z – потенциал ионизации состояния m иона с зарядом z .

Полученная система дифференциальных уравнений (1)–(7) дополняется соответствующими начальными условиями ($t = 0$):

$$N_0(0) = N_0^0, \quad N_m(0) = N_m^0, \quad N_e(0) = N_i(0) = N_e^0,$$

$$T_e(0) = T_i(0) = T_0. \quad (8)$$

Присутствие внешнего источника энергии (лазера) приводит к нарушению равновесного распределения. В одном случае в силу радиационных потерь концентрации заряженных частиц и возбужденных состояний могут быть меньше концентраций Саха – Больцмана, а средний заряд плазмы оказывается меньше равновесного [3]. В другом случае может реализовываться обратная ситуация, когда при резонансном поглощении квантов энергии происходит насыщение возбужденных состояний частицы, концентрации которых больше равновесных концентраций Саха – Больцмана при той же температуре, а средний заряд плазмы больше равновесного [5].

Решая совместно систему кинетических обыкновенных дифференциальных уравнений (1)–(5) и уравнений баланса энергии (6), (7) с начальными условиями (8) и заданным внешним источником энергии, можно получить новые (не саха – больцмановские) населенности уровней, которые позволяют рассчитать не только относительные интенсивности линий, но и их абсолютные значения.

Отметим, что описание процессов заселения уровней и зарядового состава плазмы в неравновесном приближении в последние годы находит все более широкое распространение [7–14]. Основной отличительной чертой неравновесной ионизации атомов и ионов большинства химических элементов, в частности металлов, является то, что их энергетические уровни расщеплены и перемешаны между собой. Поэтому при описании поуровневой кинетики необходимо учитывать большое число возбужденных состояний (порядка 10 для каждой частицы) и столкновительно-радиационных переходов между ними [7, 8].

Не претендуя на полноту цитирования, отметим среди многих публикаций работы, в которых изложены наиболее типичные подходы. В зависимости от поставленных целей и рассматриваемого химического элемента наиболее часто используются двух- [9] и трехуровневые [10–12] кинетические модели, входящие, как правило, в виде составной части в более сложные модели газовой динамики [13] или радиационной газовой динамики [14]. Наиболее полная кинетическая модель, описывающая процесс неравновесной ионизации атомов и ионов металлов, представлена в работах [7, 8]. Однако в них не учитываются фотопроцессы. В настоящей работе модель из [7, 8] дополнена фотопроцессами в полях лазерного излучения и континуума.

Кинетическая неравновесная столкновительно-радиационная модель (1)–(8) использовалась нами при изучении процесса оптического пробоя [5, 6]. В этих же работах приведены выражения для всех кинетических коэффициентов.

3. Механизмы уширения спектральной линии

Вследствие эффектов уширения излучение атома или иона при переходе между дискретными состояниями m и n не является строго монохроматичным. Контур каждой спектральной линии определяется центральным ядром, форма которого рассчитывается в ударном приближении, и крыльями, уширение которых обусловлено ионными полями. В общем случае ядро линии описывается фойгтовской спектральной функцией $S_{mn}^z(\Delta\omega)$, которая является сверткой доплеровского ($^D S_{mn}^z(\Delta\omega)$) и лоренцевского ($^L S_{mn}^z(\Delta\omega)$) контуров [15]:

$$S_{mn}^z(\Delta\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} {}^L S_{mn}^z(\Delta\omega) {}^D S_{mn}^z(\Delta\omega) d\omega$$

$$= \frac{a}{\pi^{3/2} \omega_D} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-y^2) dy}{a^2 + [(\Delta\omega/\omega_D) - y]^2}, \quad (9)$$

где $a = \Delta\omega_L/\Delta\omega_D$; $\Delta\omega = \omega - \omega_{mn}^0$; $\omega_{mn}^0 = E_{mn}/\hbar$ – частота центра линии; E_{mn} – энергия перехода $m - n$; $\Delta\omega_D = (\omega_{mn}/c)(2T_i/M)^{1/2}$ [15] – доплеровское уширение; $\Delta\omega_L = \Delta\omega_H + \Delta\omega_N + \Delta\omega_4$ – лоренцевское уширение, определяемое суммой различных столкновительных механизмов; $\Delta\omega_H = (A_n + A_m)/2$ [15] – естественная ширина линии; A_n и A_m – вероятности распада уровней n и m ; $\Delta\omega_N = \pi r_a^2 v_a \times \sum N_m^0$ [16] – уширение нейтральными частицами; $v_a = (2T_i/M_a)^{1/2}$ – скорость атома; r_a – радиус атома; $\Delta\omega_4$ – уширение электрическим полем электронов и ионов (квадратичный эффект Штарка).

Для спектральных линий неводородоподобных атомов имеет место квадратичный эффект Штарка, при котором расщепление линий пропорционально квадрату напряженности электрического поля. В случае адиабатических столкновений [15]

$$\Delta\omega_4 = 38.8 C_4^{2/3} [(v_e^{1/3} + v_i^{1/3}) N_e + 2v_i^{1/3} N_i], \quad (10)$$

$$C_4 = \frac{e^4 \bar{z}^2}{2m_e \hbar} \left(\sum_{m < n} \frac{f_{mn}}{\omega_{mn}^2} - \sum_{k < m} \frac{f_{km}}{\omega_{km}^2} \right), \quad (11)$$

где v_e и v_i – тепловые скорости электрона и иона. Учет неадиабатичности столкновений осуществлялся с помощью функции $J(\beta)$ [17]:

$$C_{4e} = C_4 J(\beta), \quad (12)$$

где

$$\beta = \left(f_{mn} \frac{Ry}{E_{mn}} \right)^{1/2} \frac{E_{mn}}{T_e} \quad (\beta \in [0, \infty])$$

– безразмерный параметр; f_{mn} – сила осциллятора перехода; ω_{mn} – частота перехода; \bar{z} – заряд плазмы; Ry – постоянная Ридберга. Параметр $\beta \rightarrow \infty$ соответствует адиабатическому возмущению уровней, а в случае преобладания неупругих столкновений $\beta \rightarrow 0$ и $J(\beta) \rightarrow 0$.

Ударное приближение справедливо в частотном диапазоне $\omega_{mn} \ll \Omega_{e,i}$ [17], где $\Omega_{e,i} = v_{e,i} \rho_B^{-1/3}$ – частоты Вайскопфа для электронов и ионов;

$$\rho_B^{-3} = 5.1 \times 10^{19} \frac{E_{mn}^2 T^{1/2}}{f_{mn} \bar{z}^{5/2}}$$

– радиус Вайскопфа; T – температура плазмы. Частотному диапазону $\omega_{mn} \gg \Omega_{e,i}$ соответствуют крылья, уширение которых обуславливается микрополями ионов и рассчитывается в приближении ближайшего соседа [15]:

$$S_{mn}^z(\Delta\omega) = \pi \frac{C_4^{3/4}}{\Delta\omega^{7/4}} N_i \exp\left(\frac{-1.33 C_4^{3/4}}{\Delta\omega^{3/4}} N_i\right). \quad (13)$$

В частотном интервале $\omega_{mn} \sim \Omega_i$ с помощью кубической сплайн-интерполяции проводится «склейка» центрального ядра (9) с крыльями (13). Для соблюдения адекватности модели необходимо следить за выполнением условия применения бинарного приближения $N_{e,i} \rho_B^3 = \epsilon_{e,i} \ll 1$ [14].

В плотной горячей плазме, где квадратичный эффект Штарка является доминирующим механизмом уширения, формирование контура линии сильно зависит от способа определения константы C_4 [18–20]. Обычно ее значения находятся в диапазоне $10^{-15} - 10^{-12} \text{ см}^4 \cdot \text{с}^{-1}$. Для сравнения приведем значения C_4 , взятые из литературных источников для разных элементов и различных длин волн переходов, и значения C_{4e} , рассчитанные по формуле (12) (табл.2). Из табл.2 следует, что константы C_4 и C_{4e} могут заметно различаться в зависимости от выбора числа учитываемых возмущающих уровней и используемых спектроскопических данных [21–23].

Табл.2.

Элемент	Длина волны перехода (нм)	C_{4e} ($\text{см}^4 \cdot \text{с}^{-1}$)	C_4 ($\text{см}^4 \cdot \text{с}^{-1}$)
Ar I	104.82	6.0×10^{-15}	8.0×10^{-15} [2]
			5.9×10^{-15} [18]
Ar I	106.66	5.8×10^{-15}	8.0×10^{-15} [2]
			6.2×10^{-15} [18]
Mg I	517.2	1.8×10^{-15}	3.0×10^{-15} [1]
Mg I	518.3	1.8×10^{-15}	3.0×10^{-15} [1]
Na I	616.07	2.3×10^{-13}	3.6×10^{-13} [15]
Na I	819.48	6.8×10^{-13}	1.1×10^{-12} [15]

4. Моделирование и анализ результатов

4.1. Моделирование контуров спектральных линий оптически прозрачной плазмы

Тестирование построенной модели уширения спектральной линии (9) проведено на основе результатов двух экспериментальных работ [24, 25], в которых были рассмотрены четыре линии. В обоих экспериментах оптиче-

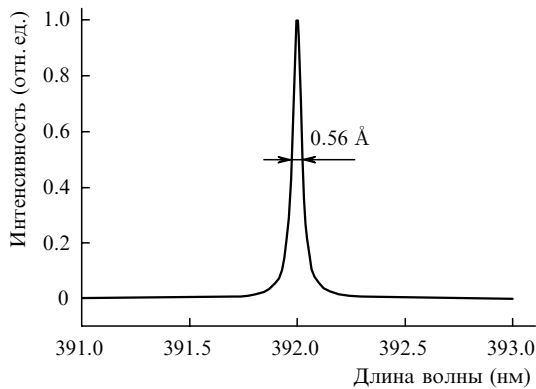


Рис.1. Профиль линии первого иона углерода С II с $\lambda = 392.0$ нм при $T = 1.82$ эВ и $N_e = 1.12 \times 10^{17}$ см $^{-3}$.

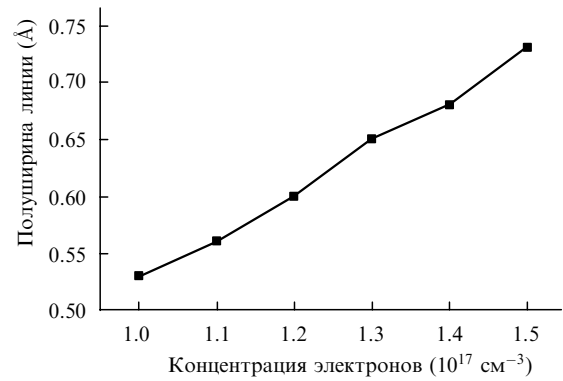


Рис.2. Зависимости полуширины спектральной линии первого иона углерода С II с $\lambda = 392.0$ нм от концентрации электронов.

кая прозрачность обеспечивалась невысокой плотностью электронов – $N_e < 2 \times 10^{17}$ см $^{-3}$.

В работе [24] измерен профиль линии первого иона углерода С II с $\lambda = 392.0$ нм в предположении локального термодинамического равновесия при температуре $T = 1.82$ эВ и электронной плотности $N_e = 1.12 \times 10^{17}$ см $^{-3}$. Полуширина этой линии была равна 0.6 \AA .

Результаты моделирования контура спектральной линии С II с $\lambda = 392.0$ нм, выполненного по модели (1)–(13), представлены на рис.1. Рассчитанная ширина составляет 0.56 \AA при тех же, что и в [24], T и N_e . Моделирование показало также, что механизмом, определяющим контур линии, является квадратичный эффект Штарка, а рассчитанный фойгтовский контур в условиях эксперимента полностью совпадает с лоренцевским. Полуширина линии, полученная в расчете, отличается от измеренной менее чем на 7%. С учетом погрешности измерения электронной концентрации данное совпадение можно считать приемлемым. Зависимость полуширины линии от электронной плотности показана на рис.2.

В работе [25] приведены полуширины линий He I с $\lambda = 587.6$ и 667.8 нм гелиевой плазмы в предположении локального термодинамического равновесия при температуре $T = 2 - 3$ эВ. Отмечено, что центральные части линий в силу расщепления имеют сложную структуру. Концентрация электронов находилась в пределах $(1 - 10) \times 10^{16}$ см $^{-3}$. Измеренные полуширины составляют $1.2 - 2.0 \text{ \AA}$ для линии He I с $\lambda = 587.6$ нм и $3 - 4 \text{ \AA}$ для линии He I с $\lambda = 667.8$ нм.

Рассчитанные полуширины равны 2.0 \AA для линии He I с $\lambda = 587.6$ нм и 3.4 \AA для линии He I с $\lambda = 667.8$ нм при $T = 2.5$ эВ и $N_e = 10^{17}$ см $^{-3}$. Доминирующим механизмом уширения линии являлся квадратичный эффект Штарка. Вычисленные полуширины линий попадают в измеренный интервал.

Для всех линий параметры, соответствующие ударному, квазистатическому и бинарному приближениям, приведены в табл.3.

Таким образом, для всех трех линий выполняются условия $\epsilon_e \ll 1$ и $\epsilon \ll 1$, что делает оправданным использо-

вание бинарного приближения. Столкновения электронов приводят к уширению центральных частей линий в ударном приближении, т. к. для всех линий справедливо неравенство $\Delta\omega \ll \Omega_e$. Поскольку выполняется неравенство $\Delta\omega < \Omega_i$, можно считать, что центральные части всех линий полностью уширяются в ударном приближении. Если соблюдается обратное соотношение $\Delta\omega > \Omega_i$, учет квазистатического влияния ионов на центр линии является обязательным.

4.2. Моделирование спектра излучения локально равновесной плазмы

Разработанная кинетическая неравновесная столкновительно-радиационная модель (1)–(8) совместно с моделью уширения спектральных линий (9)–(13) позволяет рассчитать линейчатый спектр излучения плазмы. В основу моделирования положены результаты экспериментальной работы [26], в которой был измерен линейчатый спектр излучения плазмы Ag I. В результате измерений было установлено, что плазма находилась в состоянии локального термодинамического равновесия с температурой $T = 2.2 \pm 0.15$ эВ и электронной плотностью $N_e = (0.2 - 1.45) \times 10^{17}$ см $^{-3}$. В кинетическую модель атома аргона было включено 25 состояний и рассмотрено 45 переходов между ними. В качестве начальных параметров использовались значения температуры и плотности, полученные в [26].

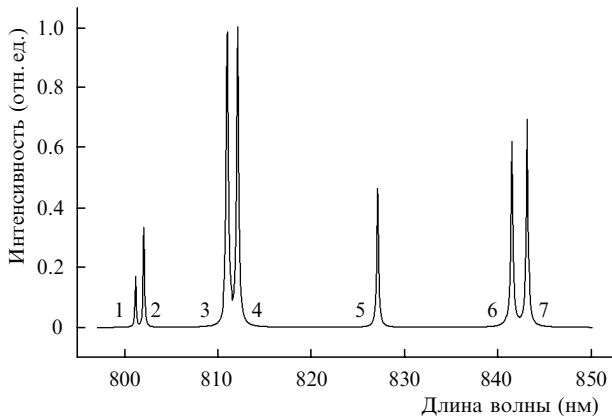
В табл.4 для Ag I приведены рассчитанные (рис.3) и полученные в эксперименте относительные интенсивности и полуширины линий. Вероятной причиной различия экспериментальных и теоретических профилей линий является неточность определения констант квадратичного эффекта Штарка, которые для линий 1–3 и 7 оказываются заниженными. Эта неточность обусловлена различными факторами. Во-первых, в модели расчета константы уширения предполагается, что возмущается только верхний уровень перехода, в то время как нижний остается невозмущенным. Из этого допущения следует равенство констант переходов C_4 , которые распадаются из одного энергетического состояния. В данном случае кон-

Табл.3.

Элемент	λ (нм)	$\Delta\lambda$ (Å)	$\Delta\omega$ (с $^{-1}$)	Ω_e (с $^{-1}$)	Ω_i (с $^{-1}$)	ϵ_e	ϵ_i
С II	392.0	0.6	7.4×10^{11}	4.1×10^{15}	2.3×10^{12}	1.2×10^{-6}	1.8×10^{-3}
He I	587.6	2.0	2.2×10^{12}	2.4×10^{15}	5.7×10^{12}	8.6×10^{-6}	9.5×10^{-4}
He I	667.8	3.4	3.6×10^{12}	2.1×10^{15}	5.0×10^{12}	1.3×10^{-5}	1.4×10^{-3}

Табл.4.

Номер линии на рис.3	Длина волны перехода (нм)	Интенсивность (отн. ед.)		Различие интенсивностей (%)	Полуширина линии (Å)		Различие полуширин (%)	C_4 (см ⁴ ·с ⁻¹)
		Эксперимент	Расчет		Эксперимент	Расчет		
1	800.61	0.24	0.17	+29.0	1.7	2.3	35.3	1.28×10^{-15}
2	801.48	0.46	0.33	+28.0	1.8	2.3	27.8	1.26×10^{-15}
3	810.37	0.69	0.99	-44.0	-	2.1	-	1.10×10^{-15}
4	811.53	1.0	1.0	0	-	2.6	-	1.62×10^{-15}
5	826.45	0.46	0.46	0	2.2	2.3	4.6	1.29×10^{-15}
6	840.82	0.66	0.62	+6.0	2.2	2.4	9.1	1.41×10^{-15}
7	842.46	0.75	0.69	+8.0	1.9	2.3	21.1	1.26×10^{-15}

Рис.3. Равновесный спектр излучения плазмы аргона, вычисленный при $T = 2.2$ эВ, $N_e = 1.1 \times 10^{17}$ см⁻³.

станты уширения будут одинаковыми для переходов с $\lambda = 801.48$ и 842.46 нм, которые распадаются из состояния с $\Delta E = 13.095$ эВ. Во-вторых, на точность вычисления C_4 непосредственно влияет точность определения спектроскопических характеристик разных переходов. Наконец, необходим учет числа рассматриваемых уровней, которое в теоретической модели всегда конечно. В табл.5 для Ag I приведено общее число возмущающих уровней k , которые учитывались при вычислении константы уширения.

Из анализа табл.5 следует, что в диапазоне температур $T \sim 1 - 3$ эВ рассчитанные по формуле (11) константы C_4 могут отличаться от приведенных в работах [1, 2, 15, 18] примерно в два раза. Поэтому в вычислительном эксперименте представлялось допустимым использовать новую константу уширения $C_4^* = (0.5 - 2.0)C_4$.

Расчет интенсивностей и полуширин линий с новой константой C_4^* показал лучшее согласие с экспериментальными данными. Различие интенсивностей не превышает 20 %, а максимальное различие полуширин оказалось менее 10 %. В последующих расчетах в качестве константы C_4 используются полученные значения C_4^* .

Табл.5.

Номер линии на рис.3	Длина волны перехода (нм)	C_4 (см ⁴ ·с ⁻¹)	C_4^* (см ⁴ ·с ⁻¹)	Интенсивность (отн. ед.)		Полуширина линии (Å)		k
				Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет	
1	800.61	1.28×10^{-15}	6.0×10^{-16}	0.24	0.29	1.7	1.7	42
2	801.48	1.26×10^{-15}	7.5×10^{-16}	0.46	0.46	1.8	1.8	46
3	810.37	1.10×10^{-15}	1.8×10^{-15}	0.69	0.69	-	3.0	39
4	811.53	1.62×10^{-15}	1.6×10^{-15}	1.00	1.00	-	2.6	32
5	826.45	1.29×10^{-15}	1.3×10^{-15}	0.46	0.46	2.2	2.3	34
6	840.82	1.41×10^{-15}	1.4×10^{-15}	0.66	0.66	2.2	2.4	37
7	842.46	1.26×10^{-15}	1.4×10^{-15}	0.75	0.72	1.9	2.1	46

4.3. Математическое моделирование спектра излучения неравновесной лазерной плазмы

Ряд проблем лазерного воздействия, таких, например, как оптимизация импульсного лазерного напыления при формировании фотоэлектрических преобразователей на основе свинца [27], оптимизация работы источника вакуумного УФ и мягкого рентгеновского излучения [28–30], основанной на радиационном охлаждении лазерной плазмы, требуют детальной информации о физических процессах. Спектроскопическая диагностика является одним из эффективных средств решения подобных проблем. Специфическим свойством лазерной плазмы является термодинамическая неравновесность, обусловленная выделением энергии лазерного импульса в электронной компоненте, гидродинамическим разлетом вещества и выносом излучения. Отсутствие локального термодинамического равновесия в плазме с произвольной прозрачностью существенно влияет на состав плазмы, степень ее ионизации и коэффициенты поглощения, что в конечном итоге значительно усложняет расчет спектра излучения.

В данном разделе для неравновесной плазмы, формирующейся в атмосфере аргона, была исследована динамика спектра излучения и определены его основные параметры. Лазерная плазма формировалась под действием излучения неодимового лазера ($\lambda = 1.06$ мкм) на плазму аргона с начальными температурой $T_0 = 0.5$ эВ и концентрацией $N_0 = 2 \times 10^{17}$ см⁻³. Значения интенсивности $G \approx 1.1 \times 10^8$ Вт/см² и длительности лазерного импульса $\tau \approx 0.1$ с подбирались так, чтобы к концу импульса система перешла в равновесное стационарное состояние с параметрами, соответствующими эксперименту [26].

Динамика развития плазменного разряда представлена на рис.4. Электронная компонента аргоновой плазмы интенсивно поглощает лазерное излучение, вызывая к моменту времени $t \approx 5 \times 10^{-5}$ с разогрев свободных электронов до температуры $T_e \approx 0.8$ эВ (рис.4,б). Это приводит к возрастанию концентраций возбужденных состояний $N_1 - N_{12}$ на 1–2 порядка (рис.4,а) и концент-

рации электронов в 1.3 раза (рис.4,б), что значительно ниже равновесной концентрации электронов $N_e^{\text{Saha}}(T_e)$, рассчитанной по формулам Саха при электронной температуре. Затем процесс переходит в медленную стадию развития оптического пробоя, на которой происходит постепенное накопление возбужденных состояний при практически неизменных значениях T_e и N_e . При $t = (2 - 4) \times 10^{-2}$ с развивается быстрая стадия пробоя, связанная с интенсивной ионизацией возбужденных состояний. Неравновесная каскадная ионизация сопровождается быстрым ростом концентрации и энергии свободных электронов, а также постепенным выравниванием температур T_e и T_i . К моменту времени $t \approx 0.5$ с система переходит в равновесное стационарное состояние с температурой $T_e = T_i \approx 2.35$ эВ, концентрацией электронов $N_e \approx 1.8 \times 10^{17}$ см $^{-3}$ и степенью ионизации, близкой к единице (рис.4).

Сложная динамика плазменного разряда соответствующим образом проявляется в спектре излучения и доминирующих механизмах уширения линий. На рис.5–10 представлены спектры излучения и спектральные функции $S(\lambda)$ неравновесной плазмы аргона, соответствующие

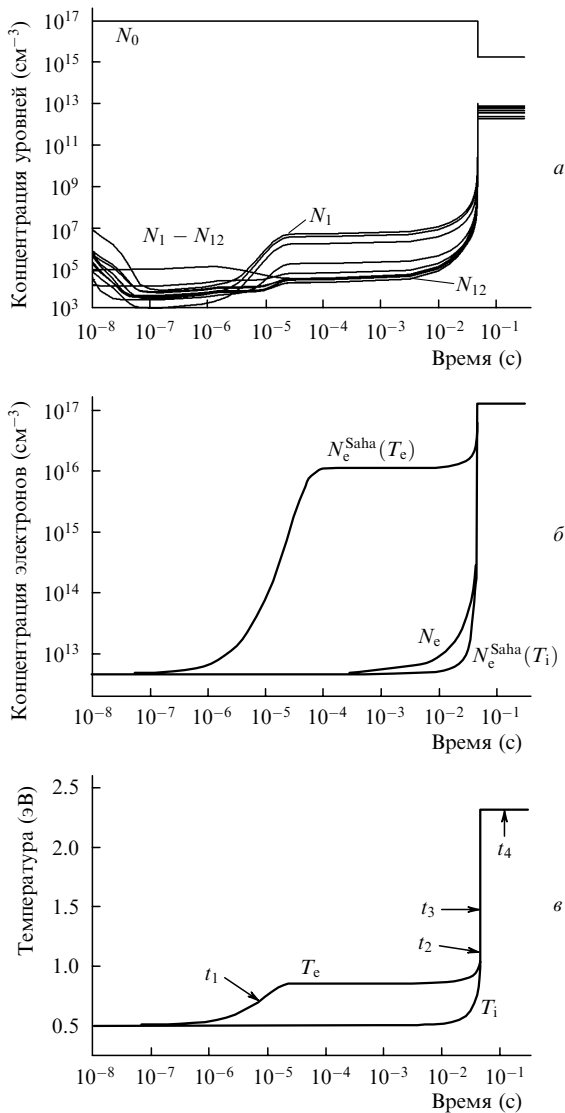


Рис.4. Временные зависимости концентраций возбужденных состояний атома (а) и электронов (б), а также электронной и ионной температур (в).

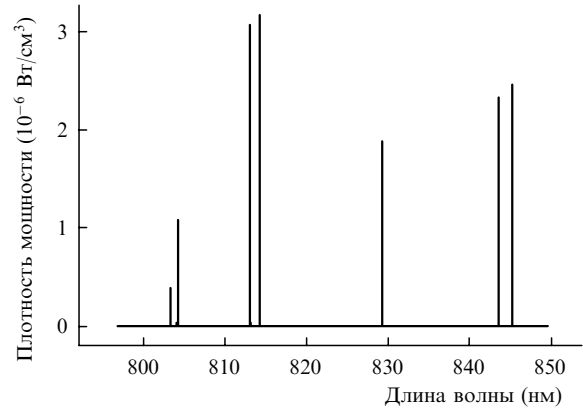


Рис.5. Неравновесный спектр плазмы аргона, полученный при $T_e = 0.88$ эВ, $T_i = 0.54$ эВ, $N_e = 1.9 \times 10^{13}$ см $^{-3}$.

ющие четырем моментам времени $t_1 - t_4$, отмеченным стрелками на рис.4,в.

На рис.5 приведен спектр излучения плазмы аргона, соответствующий моменту t_1 и определяемый до наступления оптического пробоя ($v_{en} \geq v_{ei}$) при $T_e = 0.88$ эВ, $T_i = 0.54$ эВ, $N_e = 1.9 \times 10^{13}$ см $^{-3}$. Поскольку плотность электронов невысока, основным механизмом уширения является эффект давления, т. е. столкновение с нейтральными частицами. Амплитуды спектральных функций $S(\lambda)$ практически одинаковы для всех линий и составляют $\sim 4 \times 10^{-11}$ с. Населенности возбужденных состояний равны $10^4 - 10^5$ см $^{-3}$, поэтому плотности мощности излучения линий принимают значения $\sim 10^{-6}$ Вт/см 3 (рис.5).

На рис.6 (момент времени t_2) приведен спектр излучения после наступления оптического пробоя ($v_{en} \leq v_{ei}$) при $T_e = 0.95$ эВ, $T_i = 0.73$ эВ, $N_e = 8.5 \times 10^{13}$ см $^{-3}$. Населенности возбужденных состояний возрастают в 20–100 раз, что приводит к росту плотности мощности линий до $10^{-5} - 10^{-4}$ Вт/см 3 и некоторому уменьшению амплитуды спектральной функции (до $\sim 3 \times 10^{-11}$ с), обусловленному возрастающим влиянием эффекта Штарка.

Момент времени t_3 на рис.4,в соответствует фактическому достижению локального термодинамического равновесия в плазме при $T_e = 1.38$ эВ, $T_i = 1.35$ эВ, $N_e = 1.4 \times 10^{16}$ см $^{-3}$. Доминирующую роль в уширении линий играет эффект Штарка. Поэтому плотность мощности излучения линий продолжает расти и достигает 0.1–0.7 Вт/см 3 (рис.7), а амплитуды спектральных функций $S(\lambda)$ уменьшаются по сравнению с амплитудами в момент времени t_2 в 2–5 раз (рис.8).

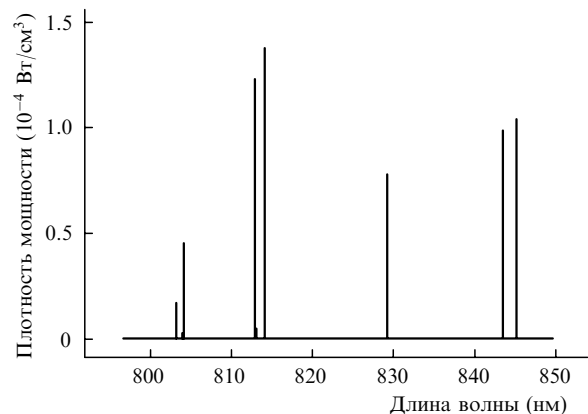


Рис.6. Неравновесный спектр плазмы аргона, полученный при $T_e = 0.95$ эВ, $T_i = 0.73$ эВ, $N_e = 8.5 \times 10^{13}$ см $^{-3}$.

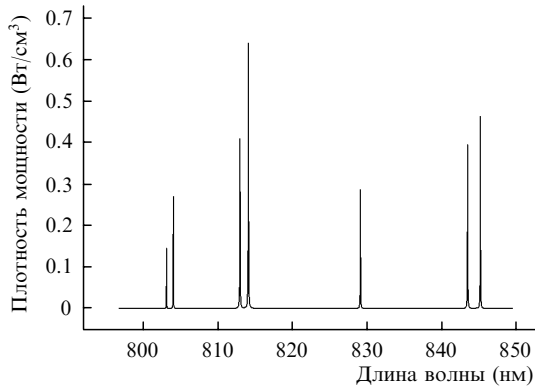


Рис.7. Неравновесный спектр плазмы аргона, полученный при $T_e = 1.38$ эВ, $T_i = 1.35$ эВ, $N_e = 1.4 \times 10^{16}$ см $^{-3}$.

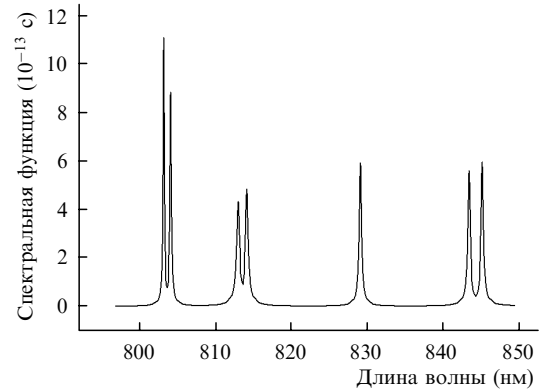


Рис.10. Спектральная функция $S(\lambda)$, соответствующая равносному спектру на рис.9.

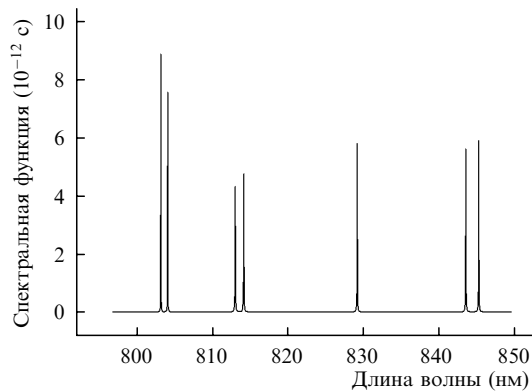


Рис.8. Спектральная функция $S(\lambda)$, соответствующая неравновесному спектру на рис.7.

Спектр излучения и спектральные функции, представленные на рис.9 и 10, соответствуют равносному спектру (момент времени t_4 на рис.4,б) при переходе системы в стационарное состояние с температурой $T = 2.35$ эВ и концентрацией электронов $N_e = 1.8 \times 10^{17}$ см $^{-3}$. Равноесные населенности уровней достигают $10^{12} - 10^{13}$ см $^{-3}$, а плотность мощности излучения линий составляет $0.5 - 1.5$ Вт/см 3 .

Моделирование показало, что максимальная плотность мощности излучения в течение всего периода взаимодействия достигается перед выходом системы на стационар, когда температура и электронная плотность уже стабилизировались, а населенности уровней достигают максимального значения перед их разрушением (рис.4,а).

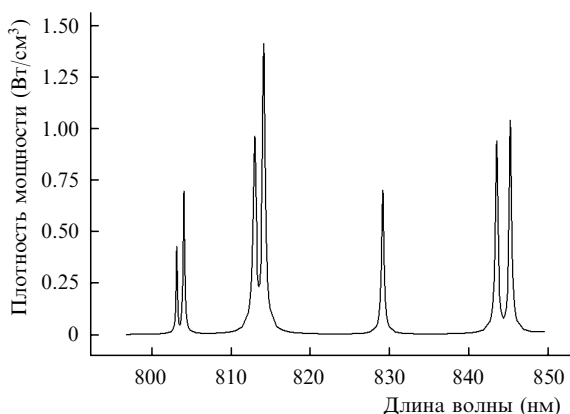


Рис.9. Равноесный спектр плазмы аргона, полученный при $T = 2.35$ эВ, и $N_e = 1.8 \times 10^{17}$ см $^{-3}$.

После достижения стационарного состояния плотность мощности излучения каждой линии уменьшается по сравнению с максимальной на 20% – 30%.

В табл.6 приведены вычисленные относительные интенсивности линейчатого излучения равносного спектра и данные эксперимента [26]. Относительные интенсивности обоих спектров совпадают со вполне приемлемой точностью.

Таким образом, спектры равносной и неравновесной плазмы могут сильно отличаться друг от друга, даже если они соответствуют одинаковым температурам и исходным концентрациям частиц.

Табл.6.

Номер линии на рис.3	Длина волны перехода (нм)	Интенсивность (отн. ед.)	
		Эксперимент [26]	Моделирование
1	800.61	0.29	0.30
2	801.48	0.46	0.49
3	810.37	0.69	0.68
4	811.53	1.00	1.00
5	826.45	0.46	0.50
6	840.82	0.66	0.67
7	842.46	0.72	0.73

5. Заключение

Таким образом, в настоящей работе рассчитан спектр линейчатого излучения неравновесной лазерной плазмы аргона, а также построена полная кинетическая столкновительно-радиационная модель, описывающая процессы неравновесного заселения уровней с учетом основных механизмов уширения и неравновесной ионизации атомов и ионов. Кинетическая модель дополняется уравнениями баланса энергии электронов и атомов.

Разработанная физико-математическая модель тестировалась на основе данных ряда экспериментов, в которых параметры линий для различных элементов (He, C, Ar) измерялись в условиях локального термодинамического равновесия. Сравнение результатов моделирования и измерений продемонстрировало приемлемое совпадение полуширин линий и их частотных профилей.

Математическое моделирование плазмы оптического пробоя аргона показало, что интенсивности неравновесных линейчатых спектров могут быть заметно (в несколько раз) меньше интенсивности равносных. Ис-

пользование более коротких и мощных лазерных импульсов приводит к тому, что неравновесный спектр отличается от равновесного не только количественно, но и качественно, т. е. спектры содержат различное число линий.

Полученные результаты могут служить обоснованием для применения предложенных физико-математических моделей при моделировании неравновесных динамических ситуаций в плазменных разрядах и построении соответствующих линейчатых спектров.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 04-01-00701.

1. Грей Д. *Наблюдение и анализ звездных атмосфер* (М.: Мир, 1980).
2. Грим Г. *Уширение спектральных линий в плазме* (М.: Мир, 1978).
3. Гудзенко Л.И., Яковленко С.И. *Плазменные лазеры* (М.: Атомиздат, 1978, с. 256).
4. Ступицкий Е.Л., Любченко О.С., Худавердян А.М. *Квантовая электроника*, **12** (5), 1038 (1985).
5. Мажукин В.И., Никифоров М.Г., Носов В.В. *Математическое моделирование*, **4** (4), 3 (2002).
6. Mazhukin V.I., Nossov V.V., Nickiforov M.G. *J. Appl. Phys.*, **93** (1), 56 (2003).
7. Mazhukin V.I., Gusev I.V., Smurov I., Flamant G. *Microchemical J.*, **50**, 413 (1994).
8. Mazhukin V.I., Nossov V.V., Smurov I., Flamant G. *Serv. Math. Ind.*, **10**, 45 (2001).
9. Бункин Ф.В., Держиев В.В., Яковленко С.И. *Квантовая электроника*, **8** (8), 1621 (1981).
10. Гаврилюк А.П., Шапарев Н.Я., Якубайлик О.Э. *Квантовая электроника*, **20** (8), 828 (1993).
11. Малама Ю.Г., Марченко В.С. *Физика плазмы*, **11** (10), 1181 (1985).
12. Виноградов А.В., Шляпцев В.Н. *Квантовая электроника*, **10** (3), 516 (1983).
13. Виноградов А.В., Шляпцев В.Н. *Квантовая электроника*, **10** (3), 509 (1983).
14. Держиев В.И., Жидков А.Г., Яковленко С.И. *Излучение ионов в неравновесной плотной плазме* (М.: Энергоатомиздат, 1986).
15. Собельман И.И. *Введение в теорию атомных спектров* (М.: Наука, 1963).
16. Фриш С.Э. *Оптические спектры атомов* (М.: Наука, 1963, с. 636).
17. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий* (М.: Наука, 1979).
18. Moo-Young G.A., Greig J.R., Griem H.R. *Phys. Rev. A*, **2**, 1617 (1970).
19. Каменщиков В.А., Пластинин Ю.А., Николаев В.М., Новицкий Л.А. *Радиационные свойства газов при высоких температурах* (М.: Машиностроение, 1971).
20. Травинг Г. В кн.: *Методы исследования плазмы*. Под редакцией В.Лохте-Хольтгрёвена (М.: Мир, 1971, с. 57–107).
21. Wiese W.L., Smith M.W., Glennon V.M. *Transition Probabilities* (Washington: NBS, 1966, Vol. 1, p. 156).
22. Wiese W.L., Smith M.W., Miles B.M. *Transition Probabilities* (Washington: NBS, 1969, Vol. 2, p. 268).
23. Ralchenko Yu., Jou F.-C., Kelleher D.E., Kramida A.E., Musgrove A., Reader J., Wiese W.L., Olsen K. *Atomic Spectra Database Lines Form*; <http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents-atomic.html>.
24. Harial S.S., Bindhu C.V., Issac R.C., Nampoori V.P.N., Vallabhan C.P.G. *J. Appl. Phys.*, **82** (5), 2140 (1997).
25. Гавриленко В.П., Кирий Н.П., Франк А.Г. *Оптика и спектроскопия*, **87** (6), 916 (1999).
26. Зобнин А.В., Исакаев Э.Х., Чиннов В.Ф. *ТВТ*, **36** (5), 804 (1998).
27. Шуаибов А.К., Чучман М.П., Шимон Л.Л. *ЖТФ*, **74** (2), 133 (2004).
28. Carrol P.K., Kennedy E.T., O'Sullivan G. *IEEE J. Quantum Electron.*, **19** (12), 1807 (1987).
29. Нерсиян Г.Ц., Папанян В.О., Симонян М.В. *Оптика и спектроскопия*, **80** (4), 627 (1996).
30. Kauffman L., Phillion D.W., Spitzer R.C. *Appl. Opt.*, **32** (34), 6897 (1993).