

Е.П. Скороход, А.Ю. Гаврилова, А.Г. Киселев, О.Ф. Решетникова, А.Ю. Скалинский

Распределение возбужденных атомов в неравновесной плазме благородных газов

Московский государственный авиационный институт (технический университет)

Поступила в редакцию 2.02.2000 г.

Численным методом решена система нелинейных уравнений. Приведены фазовые диаграммы – диаграммы метаравновесных состояний Ar, Kr, Xe. Представлены характерные распределения возбужденных состояний стационарной аргоновой плазмы и экспериментальные распределения возбужденных состояний иттрия, полученные по спектрам эрозийной плазменной струи сильноточного разряда в капилляре.

Введение

В спектроскопической диагностике низкотемпературной плазмы, в изучении плазмы активных сред [1–3] обычно используется приближение ЛТР (локальное термодинамическое равновесие). В этом случае распределение возбужденных состояний (РВС) атома (значения заселенности в логарифмическом масштабе в зависимости от энергии уровня) характеризуется прямой, наклон которой определяет так называемую температуру рассматриваемого РВС, совпадающую с температурой электронов.

В тех задачах, когда допустимо полагать, что в процессах обмена энергией доминирующую роль играют электронные столкновения (всеми остальными пренебрегаем), распределения частиц по энергетическим состояниям отвечают модели ЛТР и подчиняются формулам Максвелла, Больцмана, Саха [2]. В рамках указанной модели решается большинство задач диагностики плазмы.

В неравновесной или согласно [4] не ЛТР-овской плазме РВС отклоняется от распределения Больцмана. В некоторых случаях, например [5–7], РВС имеет вид ломаной кривой. Заселенности, в пределах ошибки, ложатся на две прямые с разным наклоном.

Согласно [8] распределение вероятностей сложной системы распадается на произведение множителей, каждый из которых зависит только от величин, описывающих одну из частей, и эти части уже статистически независимы. Справедливо утверждение [8]: если f_1 и f_2 – две физические величины, относящиеся к двум различным подсистемам, то среднее значение произведения $f_1 f_2$ равно корню из произведения средних значений каждой из величин f_1 и f_2 в отдельности:

$$\overline{f_1 f_2} = \sqrt{\overline{f_1} \overline{f_2}} \quad (1)$$

Это означает, что если на бесконечно большом интервале времени устанавливается больцмановское распределение, то на меньших временах не исключается возможность другого распределения в виде ломаной, для средних величин которых справедливо (1).

Распределение возбужденных атомов в столкновительно-излучательной модели

Обратимся к одной из первых работ [9], имеющих прямое отношение к созданию плазменных лазеров. Как и во всех последующих теоретических моделях плазменных лазеров, временные уравнения кинетики самосогласованы уравнениями теплового баланса для температуры электронов, особая роль отводится конверсии иона в молекулярный ион с последующей диссоциативной рекомбинацией. При теоретическом рассмотрении подобных задач исходными параметрами являются температура газа T_g (не равная температуре электронов T_e), частота столкновений (частота накачки) ν , давление. В квазистационарном приближении для переохлажденной гелиевой плазмы получены важные зависимости температуры и концентрации электронов N_e и атомарных ионов гелия N^+ от концентрации гелия N (или числа ядер N_n), рис. 1.

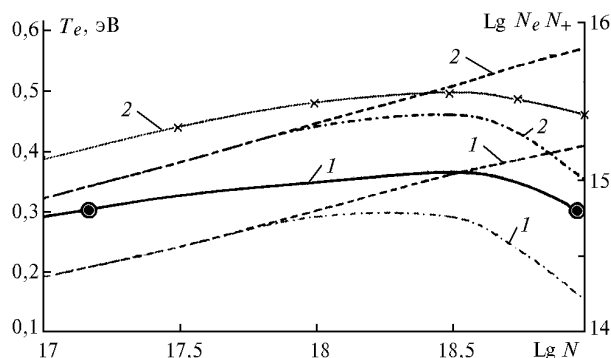


Рис. 1. Зависимость температуры и концентрации электронов и атомарных ионов гелия от его концентрации N . Сплошной кривой показана зависимость T_e , штриховой – концентрации N_e , штрихпунктирной – зависимости от N концентрации атомарных ионов. Кривые соответствуют параметрам накачки (s^{-1}): кривая 1 – $\nu = 100$; 2 – $\nu = 1000$ [9]

Отметим, что одинаковые температуры электронов имеют место при одной и той же частоте накачки, но для

разных давлений, т.е. разных N , отличающихся на полтора – два порядка.

Подобные же зависимости можно получить и при другой постановке, когда исходными параметрами являются температура газа T_g , концентрация электронов N_e (а не давление), температура электронов $T_e \approx \text{const}$ [10, 11].

В работах [10, 11] численным методом проведено решение стационарной системы нелинейных уравнений поуровневой кинетики для однокомпонентного газа с учетом радиационных переходов, возбуждения электронным ударом, конверсии иона в молекулярный ион с последующей диссоциативной рекомбинацией. Релаксационная матрица (64×64) построена для 64 уровней и тем самым учитывает ~ 3000 реакций.

Особенность записи [10] системы состоит в том, что удалось исключить концентрации N^+ и N_2^+ и получить уравнение только для вектора заселенности. Результатом решения явилась диаграмма метаравновесных состояний (рис. 2), устанавливающая однозначное соответствие между концентрацией электронов N_e , плотностью ядер N_n (N_0) при заданной температуре электронов T_e . На рис. 2 точка 1 соответствует модели ЛТР (локального термодинамического равновесия), точка 2 – столкновительно-излучательному метаравновесному состоянию (СИМР) [7]. Второй подход дает возможность построения РВС для 64 уровней и исследования их.

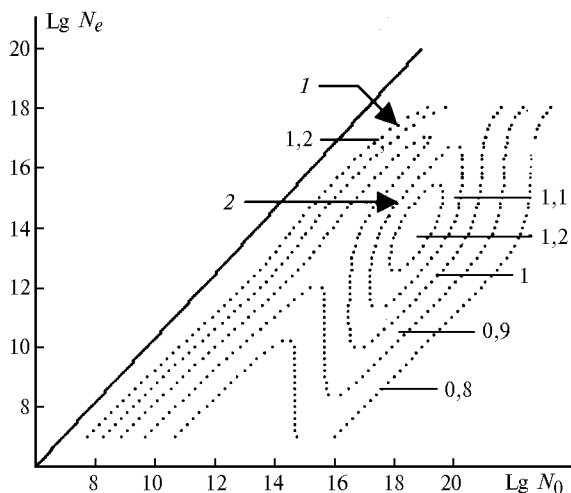


Рис. 2. Диаграмма метаравновесных состояний плазмы аргона (T_e , эВ)

Ограничимся рассмотрением процессов взаимодействия атома с электронами, такими как неупругие удары 1-го и 2-го рода (2), ионизация (3) и тройная рекомбинация (4), где N_i – заселенность i -го состояния ($i = 1, 2, 3, \dots, 64$):



В этом случае РВС топологически не отличается от болцмановского (рис. 3) как при больших N_e , так и при меньших, но численное значение заселенностей отличается при $\text{Lg } N_e < 16$ на порядки [7]. Кривая 4 на рис. 3 получена для значений, выделенных 1 на рис. 2, где справедлива модель ЛТР.

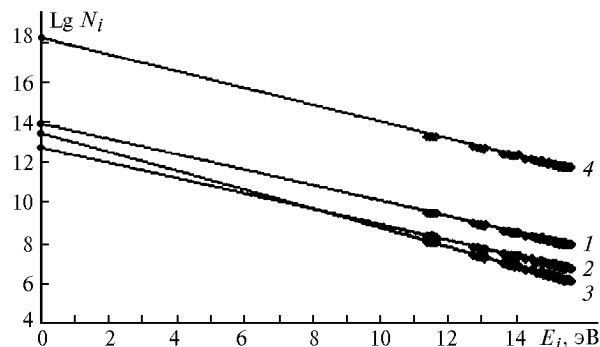


Рис. 3. РВС с учетом электронных процессов по формулам (2)–(4): 1 – $T_e = 1,1$ эВ, $N_e = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $N_0 = 10^{15,02} \text{ см}^{-3}$; 2 – $T_e = 1,1$ эВ, $N_e = 10^{14,4} \text{ см}^{-3}$, $N_0 = 10^{14,41} \text{ см}^{-3}$; 3 – $T_e = 0,9$ эВ, $N_e = 10^{14} \text{ см}^{-3}$, $N_0 = 10^{14,06} \text{ см}^{-3}$; 4 – $T_e = 1,1$ эВ, $N_e = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $N_0 = 10^{18,2} \text{ см}^{-3}$

Если в рассмотрение включить реакции конверсии и последующей диссоциативной рекомбинации



то появляется решение и в точке 2 на диаграмме (см. рис. 2). В этом случае топология РВС принципиально меняется (как будет показано на рис. 5). РВС (для аргона), являющиеся решениями стационарной системы уравнений поуровневой кинетики и относящиеся к случаю столкновительно-излучательного метаравновесия, можно охарактеризовать тремя параметрами, аналогичными температуре электронов в ЛТР. Заселенности возбужденных состояний низлежащих уровней в зависимости от их энергий возбуждения лежат на одной прямой (в логарифмическом масштабе) и имеют температуру возбуждения $T_{\text{возб}}^{(1)}$; заселенности следующей группы в зависимости от энергии возбуждения лежат на прямой с температурой возбуждения $T_{\text{возб}}^{(2)}$. Температура возбуждения уровней, примыкающих к континууму $T_{\text{возб}}^{(3)}$, равна температуре электронов T_e . Выполняется следующее условие:

$$T_e = T_{\text{возб}}^{(3)} > T_{\text{возб}}^{(1)} > T_{\text{возб}}^{(2)}.$$

Авторы [5, 6] выбирают тождественную схему уровней аргона ($n = 64$), одинаково учитывают электронные и фотонные процессы, но в отличие от [10] не включают в рассмотрение реакции (5) и (6). В расчете [6] принимаются во внимание уход частиц на стенку и убыль метастабильных состояний в возбужденную молекулу, благодаря чему система уравнений становится нелинейной. Нелинейность кинетических уравнений [6, 10] обусловлена разными реакциями и, несмотря на это, топология РВС имеет одинаковый характер.

Следует подчеркнуть, что выполняется условие (1): корень из произведения температур, соответствующих «ломаному» РВС, $\sqrt{T_{\text{возб}}^{(1)} T_{\text{возб}}^{(2)}}$ равен температуре саха-больцмановского распределения.

РВС и дуговой разряд в аргоне

В известной работе В.Н. Колесникова [12] исследовался дуговой разряд атмосферного давления в аргоне с незначительной примесью водорода. На рис. 4 представ-

лены его температурные зависимости (сплошные кривые), полученные по разным методикам: сплошная кривая 1 получена из относительных измерений температуры электронов T_e по тормозному излучению; сплошная кривая 2 соответствует температуре возбуждения по заселенностям уровней аргона относительно основного состояния; кривая 3 – из формулы Саха; сплошная кривая 4 – температура возбуждения из заселенностей высоколежащих уровней.

В монографии [13] приводятся лишь две кривые из рис. 4 – кривые 1 и 4, причем кривая 1 трактуется как изменение электронной температуры в зависимости от концентрации электронов N_e (с чем нельзя не согласиться), а 4 приписывается температуре газа (что не очевидно).

Расчеты поуровневой кинетики в аргоне с учетом реакций (2)–(6) подтверждают ход экспериментальных температурных зависимостей (см. рис. 4, штриховые кривые). РВС, по которым рассчитывались температурные зависимости, приведены на рис. 5, б, в, г. Кривые 1 РВС соответствуют заданным параметрам, указанным под ними.

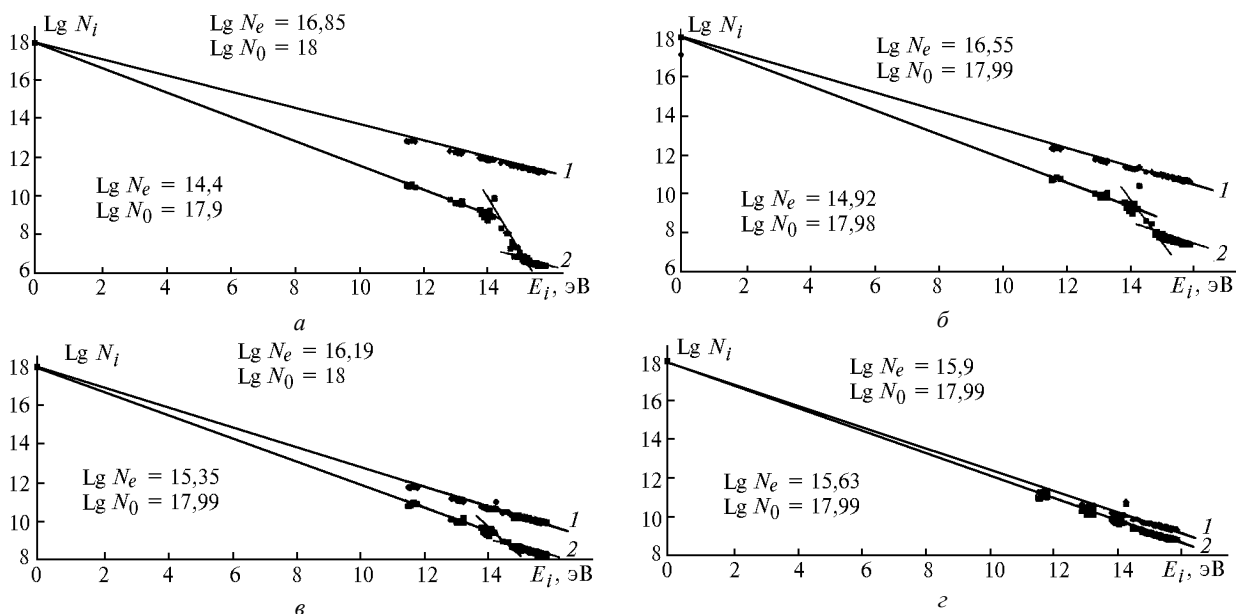


Рис. 5. РВС в аргоне: а – $T_e = 1,1$ эВ, 1 – $N_e = 10^{16,85}$ см⁻³, $N_0 = 10^{18}$ см⁻³, 2 – $N_e = 10^{14,4}$ см⁻³, $N_0 = 10^{17,9}$ см⁻³; б – $T_e = 1,05$ эВ, 1 – $N_e = 10^{16,55}$ см⁻³, $N_0 = 10^{17,99}$ см⁻³, 2 – $N_e = 10^{14,92}$ см⁻³, $N_0 = 10^{17,98}$ см⁻³; в – $T_e = 1,0$ эВ, 1 – $N_e = 10^{16,19}$ см⁻³, $N_0 = 10^{18}$ см⁻³, 2 – $N_e = 10^{15,35}$ см⁻³, $N_0 = 10^{17,99}$ см⁻³; г – $T_e = 0,97$ эВ, 1 – $N_e = 10^{15,9}$ см⁻³, $N_0 = 10^{17,99}$ см⁻³, 2 – $N_e = 10^{15,63}$ см⁻³, $N_0 = 10^{17,99}$ см⁻³

Заключение

Численным методом проведено решение системы нелинейных уравнений поуровневой кинетики плазмы благородных газов. Основным итогом работы являются диаграммы метаравновесных состояний как результат анализа стационарных нелинейных дифференциальных уравнений. Вместо формулы Саха имеем диаграмму метаравновесных состояний, однозначно связывающих плотность, концентрацию и температуру электронов.

В квазистационарном режиме возможно квазиравновесие. Заселенности возбужденных состояний низколежащих уровней в зависимости от их энергий возбуждения лежат на одной прямой (в логарифмическом

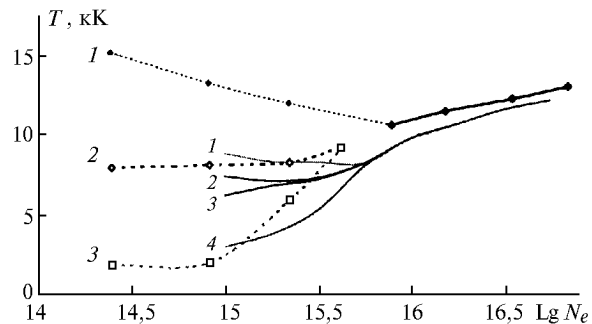


Рис. 4. Температуры, измеренные в аргонной плазме (дуговой разряд при 1 атм)

«Расслоение» температур на рис. 4 говорит о том, что вместо единого распределения, отвечающего температурной кривой 3, появились как бы две «подсистемы» со своими РВС и температурными кривыми 2 и 4. Для этих подсистем выполняется условие (1).

масштабе) и имеют температуру возбуждения $T_{возб}^{(1)}$; заселенности следующей группы уровней в зависимости от энергии их возбуждения лежат на прямой с температурой $T_{возб}^{(2)}$; температура возбуждения уровней, примыкающих к континууму $T_{возб}^{(3)}$, равна температуре электронов T_e . Выполняется условие $T > T_{возб}^{(1)} > T_{возб}^{(2)}$. Значения $T_{возб}^{(1)}$ и $T_{возб}^{(2)}$ подтверждены экспериментально в условиях стационарного дугового разряда.

Указанная теоретическая модель пригодна для анализа неравновесной плазмы в квазистационарных задачах. Нелинейность системы уравнений приводит к «ломаным» РВС, которые, как мы полагаем, можно рассматривать не только с позиций единого набора атомных возбужденных состояний, а выделить как бы две независимые подсистемы.

1. *Диагностика плазмы* / Под ред. Р. Хаддлстоуна, С. Леонарда. М.: Мир, 1967. 515 с.
2. *Грим Г.* Спектроскопия плазмы. М.: Атомиздат, 1969. 452 с.
3. *Методы исследования плазмы* / Под ред. В. Лохте-Хольтгревена. М.: Мир, 1971. 552 с.
4. *Семиохин И.А.* Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. М.: Изд-во МГУ, 1988. 174 с.
5. *Van der Mullen J.J.A.M., van der Sijde B., Schran D.C.* An analytical excitation model for an uonizing plasma // *Phys. Lett.* 1983. V. 96A. P. 239–242.
6. *Vlcek J. and Pelican V.* II: Application to low-pressure, hollow cathode arc and low-pressure glow discharges // *J. Phys. D.: Appl. Phys.* 1989. V. 22. P. 632–643.
7. *Гаврилова А.Ю., Киселев А.Г., Скороход Е.П.* и др. Метаравновесие и эрозийная плазменная струя сильноточного разряда в капилляре // *Мат. моделирование.* 1999. Т. 11. Вып. 6. С. 31–37.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 583 с.
9. *Сыцько Ю.И., Яковленко С.И.* Кинетика переохлажденной плазмы, создаваемой электронным пучком. 1974. ИАЭ–2424. 20 с. (Препринт / ИАЭ им. И.В. Курчатова).
10. *Киселев А.Г., Скороход Е.П.* Диаграмма равновесного состояния плазмы ксенона // *Горение и электродинамические явления.* Чебоксары, 1990. С. 104–110.
11. *Гаврилова А.Ю., Киселев А.Г., Скороход Е.П., Станишевская М.Е.* Столкновительно-излучательное равновесие в плазме благородных газов // *Мат. моделирование.* 1996. Т. 8. N 6. С. 103–108.
12. *Колесников В.Н.* Дуговой разряд в инертных газах // *Труды ФИАН.* 1964. Т. 30. С. 66.
13. *Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Г.* Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982. 375 с.

E.P. Skorokhod, A.Yu. Gavrilova, A.G. Kiselyov, O.F. Reshetnikova, A.Yu. Skalinskij. **Distribution of excited atoms in non-equilibrium plasma of noble gases.**

A system of non-linear equations for noble gases kinetics is solved by a numerical method. Diagrams of meta-equilibrium states for Ar, Xe, Kr are added. Distributions of excited states in stationary argon plasma and experimental distribution of excited states of yttrium, received from the spectrum of erosive plasma jet from a capillary tube are presented.