

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ВУФ ИЗЛУЧЕНИЯ В ПОЛОСАХ ЛАЙМАНА И ВЕРНЕРА ОБЪЁМНОГО ИМПУЛЬСНОГО РАЗРЯДА В СМЕСЯХ ВОДОРОДА С ГЕЛИЕМ

К. С. Гочелашвили¹, А. В. Демьянов², О. Н. Евдокимова¹,
И. В. Кочетов², Г. Ф. Макаренко¹

Самосогласованная численная модель для самостоятельного сильноточного импульсного разряда строится на основе решения уравнений населенности электронных и колебательных состояний H_2 , учитывает процессы электронной, ионно-молекулярной и колебательной кинетики, процессы прилипания и отлипания электронов к молекуле H_2 , излучение полос Лаймана и Вернера и пленение их излучения. Уравнения электронно-колебательной кинетики решаются совместно с уравнением Больцмана для функции распределения электронов по энергиям и уравнениями внешней электрической цепи.

Ключевые слова: газовый разряд, излучение в полосах Лаймана и Вернера.

Нахождение эффективных способов возбуждения активных сред для создания мощных широкоапертурных источников ВУФ излучения в области длин волн 110–180 нм в настоящее время является актуальной задачей для целого ряда фундаментальных и прикладных проблем [1].

Известно, что в этом диапазоне длин волн молекулярный водород имеет полосы люминесценции (полосы Лаймана и Вернера). Квантовый КПД полос Лаймана и Вернера достигает 70–80%, однако высокая эффективность люминесценции может быть достигнута только в сильноточном импульсном разряде при высокой концентрации электронов ($10^{14} - 10^{15}$ см⁻³), когда функция распределения электронов близка к максвелловской. Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию люминесценции

¹ ИОФ РАН, Москва 119991, ул. Вавилова, 38; e-mail: knst@kapella.gpi.ru.

² ТРИНИТИ.

молекулярного водорода в ВУФ области спектра при возбуждении в самостоятельном сильноточном импульсном разряде.

Теоретическая модель. Самосогласованная численная модель для самостоятельно-го сильноточного импульсного разряда строится на основе решения уравнений насе-ленности электронных и колебательных состояний H_2 , учитывает процессы электрон-ной, ионно-молекулярной и колебательной кинетики, процессы прилипания и отлипания электронов к молекуле H_2 , излучение полос Лаймана и Вернера и пленение их излуче-ния. Уравнения электронно-колебательной кинетики решаются совместно с уравнением Больцмана для функции распределения электронов по энергиям и уравнениями внеш-ней электрической цепи. Уравнение Больцмана для ФРЭЭ решается в двухчленном приближении и учитывает упругие столкновения электронов с атомами и молекулами, возбуждение колебательных уровней, возбуждение электронных состояний, диссоци-ацию молекул электронным ударом, ионизацию атомов и молекул и диссоциативное прилипание электронов к молекулам H_2 в основном и колебательно-возбуждённых со-стояниях, электрон-электронные столкновения. Для колебательной кинетики использо-вана упрощенная модель [2–4] с эффективными константами VV обмена, позволяющая уменьшить число необходимых вычислений.

Однородная модель самостоятельного разряда в смесях H_2 -He позволяет предска-зать эволюцию тока разряда в этих смесях вплоть до контракции разряда. В чис-ленной модели разряда для смеси H_2 -He учитываются процессы электронной, ионно-молекулярной и колебательной кинетики, приведенные в таблице 1. Сечения взаимо-действия электронов с молекулами H_2 взяты соответственно из работы [5]. Заметим, что возбуждение наиболее низколежащего электронного состояния молекулы H_2 $b^3 \Sigma_u^+$ при-водит к ее диссоциации. В модели учитываются два электронно-возбужденных состоя-ния гелия. Нижнее метастабильное состояние с энергией 19.8 эВ, обозначенное как He^* , и эффективный электронный уровень He^{**} с энергией 20.6 эВ. Этот уровень заменяет собой остальные более высоколежащие электронные уровни. Сечение возбуждения это-го уровня представляет собой сумму сечений указанных уровней. Эти сечения, а также сечение ионизации электронным ударом и транспортное сечение рассеяния электронов на атоме гелия взяты из работы [6]. Сечение ионизации из нижнего метастабильного гелия взято из работы [7], а сечение ионизации из эффективного состояния He^{**} таким же, как и для He^* , но сдвинутым на разность энергий этих электронных состояний.

Для описания самостоятельного разряда модель учитывает процессы ступенчатой ионизации. Сечения этих процессов пересчитаны из сечения ионизации H_2 с использованием эмпирической формулы [8].

Также в модель включены помимо переходов в полосах Лаймана $B^1 \Sigma_u^+ - X^1 \Sigma_g^+$ (140–165 нм) и Вернера $C^1 \Pi_u - X^1 \Sigma_g^+$ (116–130 нм) радиационные процессы, расселяющие верхние электронные состояния H_2 . Времена жизни этих переходов малы, поэтому благодаря этим переходам заселяются $c^3 \Pi_u$ и $a^3 \Sigma_g^+$ состояния H_2 .

Из-за быстрого перемешивания как электронами, так и нейтральными компонентами, эффективное время жизни $c^3 \Pi_u$ и $a^3 \Sigma_g^+$ состояний H_2 относительно велико и при достаточной концентрации электронов возбуждение с этих уровней передается на $C^1 \Pi_u$ и $B^1 \Sigma_u^+$ состояния H_2 . Тем самым увеличивается эффективность излучения в полосах Лаймана и Вернера. Переход в этих полосах происходит на 4–13 колебательные уровни основного электронного терма. В модели для простоты считается, что линии Лаймана заселяют 10-й, а линии Вернера 4-й колебательные уровни. Очевидно, что по мере заселения колебательных уровней $X^1 \Sigma_g^+$ эффективное время жизни линий возрастает, а их интенсивность уменьшается. Эффекты пленения излучения также включены в модель.

На рис. 1 приведены зависимости фактора ухода (1 минус фактор пленения) от населенности колебательных состояний $X^1 \Sigma_g^+$ терма H_2 для случаев, когда вращательная структура спектров учитывается и не учитывается. Отметим, что предполагается больцмановское распределение по вращательным состояниям с поступательной температурой газа. А вероятности выхода фотона из области разряда усредняются по всем вращательным переходам. В случае оценки влияния вращательной структуры взята вероятность выхода фотона для одного вращательного перехода, соответствующего максимуму вращательного распределения. Видно, что учет вращательной структуры уменьшает влияние пленения, причем влияние различия в моделях вращательного распределения на пленение мало. Ясно, что за время импульса излучения (< 1 мкс) колебательные состояния $X^1 \Sigma_g^+$ не успевают расселяться в процессах колебательного обмена и колебательной релаксации. Однако в импульсно-периодическом режиме эти процессы будут ограничивать возможную частоту повторения импульсов. Поэтому колебательный обмен и колебательно-поступательная релаксация также учитываются в модели. В [2] отмечается, что процессы прилипания и отлипания электрона к молекулам H_2 приводят к быстрой диссоциации молекул водорода и соответственно деградации смеси.

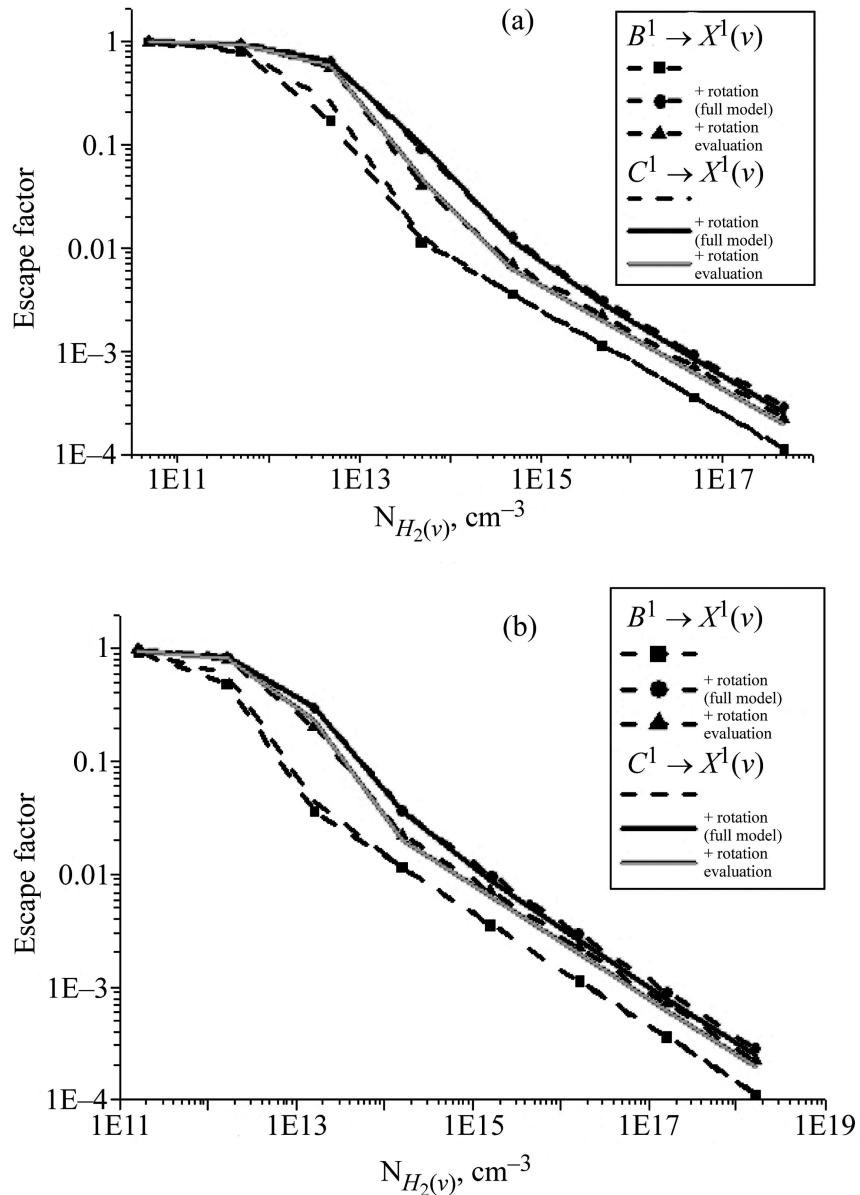


Рис. 1: Зависимость вероятности того, что фотон пройдет расстояние $R = 0.7$ см, не поглотившись, от населенности колебательного уровня $X^1 \sum(v)$ состояния H_2 ($v = 4$ для $C^1\Pi \rightarrow X^1 \sum(v)$ и $v = 10$ для $B^1 \Sigma \rightarrow X^1 \sum(v)$ перехода). Смесь $H_2:He=1:3$, давление (а) 15 и (б) 50 Торр. Нижние кривые найдены без учета вращательной структуры спектра, а верхние получены с учетом, в предположении большемановского распределения населенностей по вращательным уровням. Пояснения во врезках.

Таблица 1

*Процессы электронной, ионной, колебательной и радиационной кинетики
в плазме H₂-He*

| | Процесс | Константы, (см ³ /с, см ⁶ /с, с ⁻¹) |
|----|---|--|
| | Реакции с участием электронов | |
| 1 | $H_2 + e \rightarrow H_2(b^3 \sum_u^+) + e \leftrightarrow H + H + e$ | УБ ¹ |
| 2 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(a^3 \sum_g^+) + e$ | УБ |
| 3 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(c^3 \Pi_u) + e$ | УБ |
| 4 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(B^1 \sum_u^+) + e$ | УБ |
| 5 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(E^1 \sum_g^+) + e$ | УБ |
| 6 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(C^1 \Pi_u) + e$ | УБ |
| 7 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(e^3 \sum_g^+) + e$ | УБ |
| 8 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(B^1 \sum_u^+) + e$ | УБ |
| 9 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(d^3 \Pi_u) + e$ | УБ |
| 10 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(+) + e + e$ | УБ |
| 11 | $H(^2S) + e \leftrightarrow H(+) + e + e$ | УБ |
| 12 | $H + e \leftrightarrow H(+) + e + e$ | УБ |
| 13 | $H + e \leftrightarrow H(^2S) + e$ | УБ |
| 14 | $H + e \leftrightarrow H(^2P) + e$ | УБ |
| 15 | $H_2(a^3 \sum_g^+) + e \leftrightarrow H_2(C^1 \Pi_u) + e$ | УБ |
| 16 | $H_2(B^1 \sum_u^+) + e \leftrightarrow H_2(c^3 \Pi_u) + e$ | УБ |
| 17 | $H_2(c^3 \Pi_u) + e \leftrightarrow H_2(+) + e + e$ | УБ |
| 18 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(V = 1) + e$ | УБ |
| 19 | $H_2 + e \leftrightarrow H_2(V = 2) + e$ | УБ |
| 20 | $H_2(V = 1) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 21 | $H_2(V = 2) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 22 | $H_2(V = 3) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 23 | $H_2(V = 4) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 24 | $H_2(V = 5) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 25 | $H_2(V = 6) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 26 | $H_2(V = 7) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 27 | $H_2(V = 8) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |

| | Процесс | Константы, (см ³ /с, см ⁶ /с, с ⁻¹) |
|----|--|--|
| 28 | $H_2(V = 9) + e \rightarrow H(-) + H$ | УБ |
| 29 | $H_2(+) + e \rightarrow H + H(^2S)$ | УБ |
| 30 | $H_3(+) + e \rightarrow H + H + H$ | УБ |
| 31 | $He + e \rightarrow He(+) + e + e$ | УБ |
| 32 | $He + e \leftrightarrow He^{**} + e$ | УБ |
| 33 | $He + e \leftrightarrow He^* + e$ | УБ |
| 34 | $He^* + e \leftrightarrow He^{**} + e$ | УБ |
| 35 | $He^* + e \rightarrow He(+) + e + e$ | УБ |
| 36 | $He^{**} + e \rightarrow He(+) + e + E$ | УБ |
| 37 | $He_2(+) + e \rightarrow He^{**} + He$ | УБ |
| 38 | $H_2(a^3 \Sigma_g^+) + e \leftrightarrow H_2(c^3 \Pi_u) + e$ | $1 \cdot 10^{-7}, 1 \cdot 10^{-7}$ |
| | Ионно-молекулярные реакции | |
| 39 | $HeH(+) + H_2 \rightarrow H_3(+) + He$ | $1 \cdot 10^{-9}$ |
| 40 | $H_2(+) + H(-) \rightarrow H_2(c^3 \Pi_u) + H$ | $1 \cdot 10^{-7}$ |
| 41 | $H_3(+) + H(-) \rightarrow H + H + H + H$ | $1 \cdot 10^{-7}$ |
| 42 | $H_2(c^3 \Pi_u) + H \rightarrow H_3(+) + e$ | $1 \cdot 10^{-10}$ |
| 43 | $H(^2P) + H_2 \rightarrow H_3(+) + e$ | $1 \cdot 10^{-10}$ |
| 44 | $H_2(+) + H_2 \rightarrow H_3(+) + H$ | $2 \cdot 10^{-9}$ |
| 45 | $He^* + H_2 \rightarrow H(+) + H + He + e$ | $1 \cdot 10^{-10}$ |
| 46 | $He^* + H_2 \rightarrow HeH(+) + H + e$ | $5 \cdot 10^{-11}$ |
| 47 | $He^* + H_2 \rightarrow H_2(+) + He + e$ | $2 \cdot 10^{-11}$ |
| 48 | $He(+) + He + He \rightarrow He_2(+) + He$ | $1 \cdot 10^{-31}$ |
| 49 | $H(-) + H_3(+) \rightarrow H_2 + H_2$ | $1 \cdot 10^{-7}$ |
| 50 | $H(-) + H_2(+) \rightarrow H_2 + H$ | $1 \cdot 10^{-7}$ |
| 51 | $H(-) + H \rightarrow H_2 + e$ | $1.8 \cdot 10^{-9}$ |
| 52 | $H(-) + H_2(V = 2) \rightarrow H_2 + e + H$ | $3.4 \cdot 10^{-10}$ |
| 53 | $H(-) + H_2(V = 3) \rightarrow H_2(V = 1) + e + H$ | $8.6 \cdot 10^{-10}$ |
| 54 | $H(-) + H_2(V = 4) \rightarrow H_2(V = 2) + e + H$ | $1.6 \cdot 10^{-9}$ |
| 55 | $H(-) + H_2(V = 5) \rightarrow H_2(V = 3) + e + H$ | $2.2 \cdot 10^{-9}$ |
| 56 | $H(-) + H_2(V = 6) \rightarrow H_2(V = 4) + e + H$ | $2.7 \cdot 10^{-9}$ |
| | Реакции с тяжелыми частицами | |
| 57 | $H(^2S) + He \leftrightarrow H(^2P) + He$ | $1 \cdot 10^{-10}, 1 \cdot 10^{-10}$ |

| | Процесс | Константы, (см ³ /с, см ⁶ /с, с ⁻¹) |
|----|--|--|
| 58 | $H_2(V = 1) + H_2(V = 1) \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 2)$ | $3 \cdot 10^{-12}$ |
| 59 | $H_2(V = 2) + H_2(V = 2) \leftrightarrow H_2(V = 1) + H_2(V = 3)$ | $1.2 \cdot 10^{-11}$ |
| 60 | $H_2(V = 3) + H_2(V = 3) \leftrightarrow H_2(V = 2) + H_2(V = 4)$ | $2.7 \cdot 10^{-11}$ |
| 61 | $H_2(V = 4) + H_2(V = 4) \leftrightarrow H_2(V = 3) + H_2(V = 5)$ | $4.8 \cdot 10^{-11}$ |
| 62 | $H_2(V = 5) + H_2(V = 5) \leftrightarrow H_2(V = 4) + H_2(V = 6)$ | $7.5 \cdot 10^{-11}$ |
| 63 | $H_2(V = 6) + H_2(V = 6) \leftrightarrow H_2(V = 5) + H_2(V = 7)$ | $1.08 \cdot 10^{-10}$ |
| 64 | $H_2(V = 7) + H_2(V = 7) \leftrightarrow H_2(V = 6) + H_2(V = 8)$ | $1.47 \cdot 10^{-10}$ |
| 65 | $H_2(V = 8) + H_2(V = 8) \leftrightarrow H_2(V = 7) + H_2(V = 9)$ | $1.92 \cdot 10^{-10}$ |
| 66 | $H_2(V = 9) + H_2(V = 9) \leftrightarrow H_2(V = 8) + H_2(V = 10)$ | $2.43 \cdot 10^{-10}$ |
| 67 | $H_2(V = 10) + H_2(V = 10) \leftrightarrow H_2(V = 9) + H + H$ | $3 \cdot 10^{-10}$ |
| 68 | $H_2(V = 1) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2$ | $3.9 \cdot 10^{-16}$ |
| 69 | $H_2(V = 2) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 1)$ | $6.1 \cdot 10^{-16}$ |
| 70 | $H_2(V = 3) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 2)$ | $9.6 \cdot 10^{-16}$ |
| 71 | $H_2(V = 4) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 3)$ | $1.5 \cdot 10^{-15}$ |
| 72 | $H_2(V = 5) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 4)$ | $2.5 \cdot 10^{-15}$ |
| 73 | $H_2(V = 6) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 5)$ | $4 \cdot 10^{-15}$ |
| 74 | $H_2(V = 7) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 6)$ | $6.5 \cdot 10^{-15}$ |
| 75 | $H_2(V = 8) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 7)$ | $1.1 \cdot 10^{-14}$ |
| 76 | $H_2(V = 9) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 8)$ | $1.8 \cdot 10^{-14}$ |
| 77 | $H_2(V = 10) + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2(V = 9)$ | $2.8 \cdot 10^{-14}$ |
| | Излучательные процессы | |
| 78 | $H_2(C^1\Pi_u) \rightarrow h\nu_{120} + H_2(V = 4)$ | $1.67 \cdot 10^9$ |
| 79 | $H_2(B^1\sum_u^+) \rightarrow h\nu_{150} + H_2(V = 10)$ | $1.25 \cdot 10^9$ |
| 80 | $H_2(B^1\sum_u^+) \rightarrow h\nu_{91} + H_2$ | $1.25 \cdot 10^9$ |
| 81 | $H_2(d^3\Pi_u) \rightarrow h\nu_1 + H_2(a^3\sum_g^+)$ | $9.1 \cdot 10^7$ |
| 82 | $H_2(e^3\sum_g^+) \rightarrow h\nu_2 + H_2(a^3\sum_g^+)$ | $9.1 \cdot 10^7$ |
| 83 | $H_2(a^3\sum_g^+) \rightarrow h\nu_3 + H_2(b^3\sum_u^+)$ | $9.1 \cdot 10^7$ |

¹ УБ означает, что константы получены из численного решения уравнения Больцмана для ФРЭЭ.

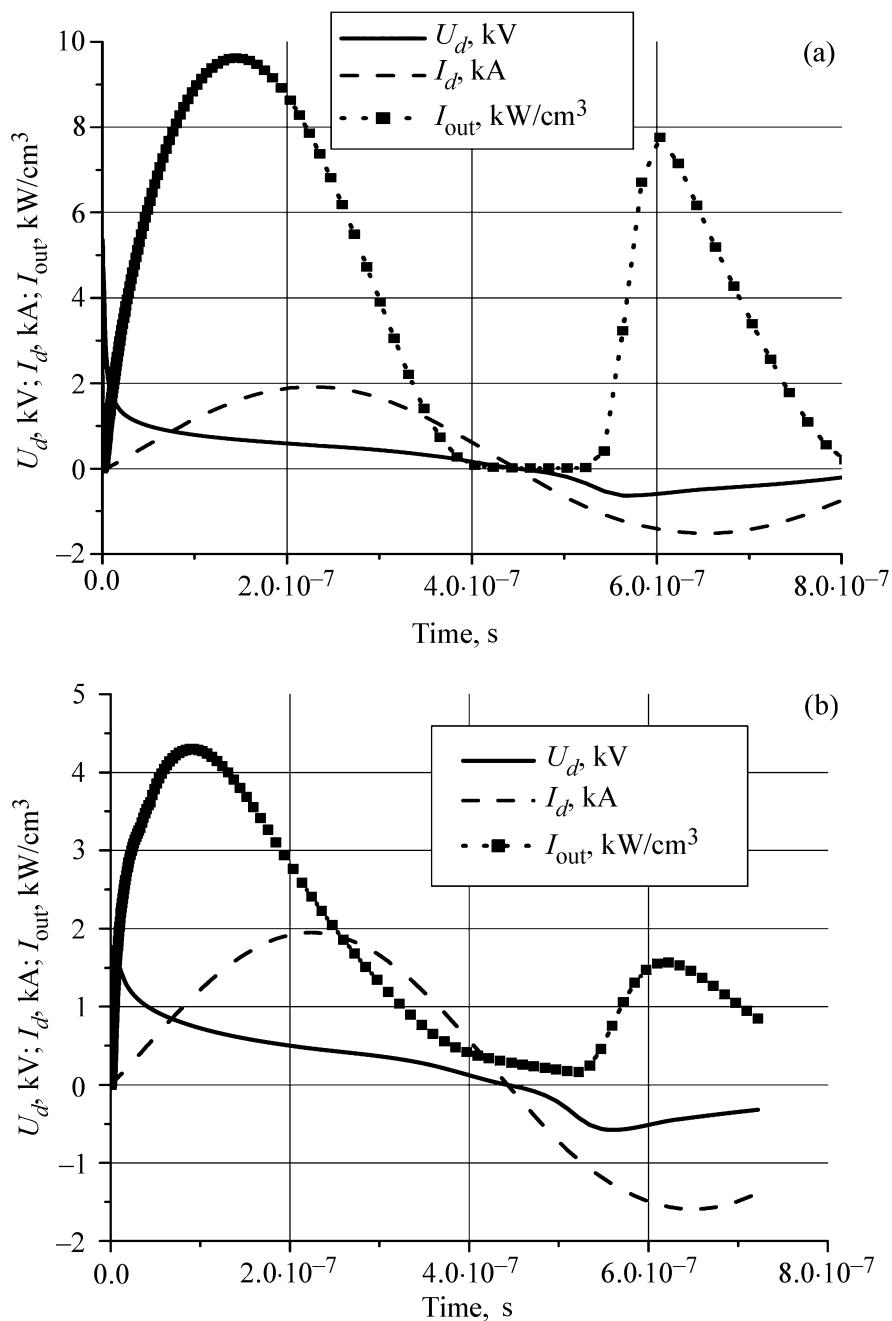


Рис. 2: Расчетные зависимости формы импульса ВУФ излучения I_{out} , напряжения U_d и тока разряда I_d . Смесь $H_2:He=1:3$, давление 50 Торр, $U_{c0} = 5 \text{ кВ}$, $C = 60 \text{ нФ}$. Расчет без учета пленения излучения (а) и с учетом пленения (б).

Результаты моделирования и обсуждения. Теоретическая модель была использована для моделирования ВУФ излучения в полосах Лаймана и Вернера импульсного

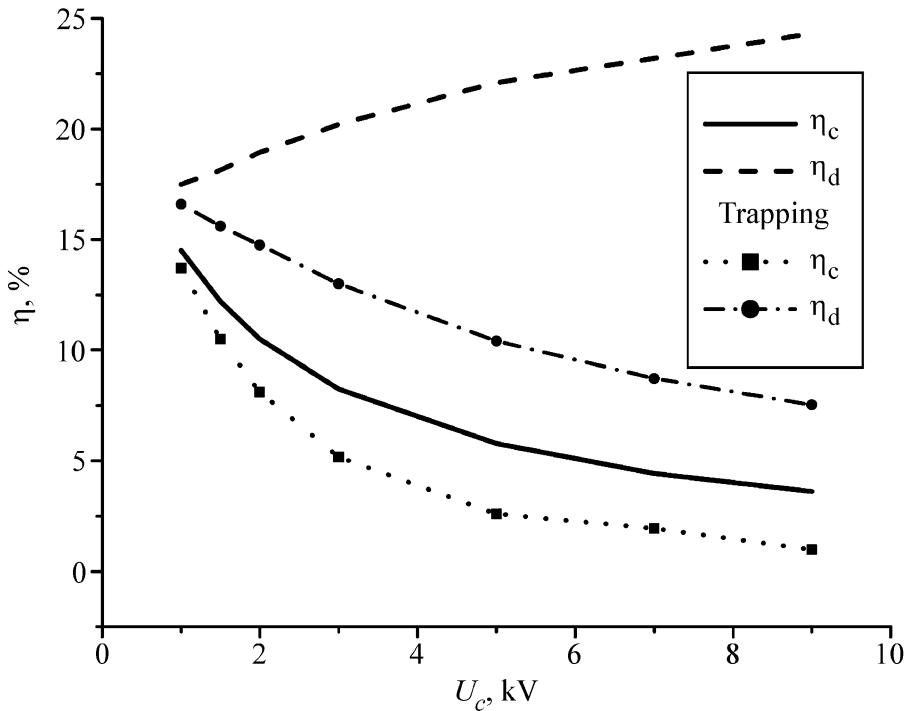


Рис. 3: Зависимость эффективности ВУФ излучения по запасенной энергии (η_c) и по вложенной в газ энергии (η_d) от зарядного напряжения. Смесь $H_2:He=1:3$, давление 15 Topp, $U_{c0} = 5$ кВ, $C = 60$ нФ. Расчеты как с учетом пленения излучения (линии с символами), так и без учета (линии без символов).

сильноточного разряда в смесях водорода с гелием. Электрическая цепь моделируется LC контуром, с параметрами $L = 300$ нГ, $C = 60$ нФ. Результаты расчетов приведены на рис. 2 без учета (а) и с учетом (б) пленения излучения. На рисунках приводится суммарная интенсивность ВУФ излучения в полосах Лаймана и Вернера. В модели $C^1\Pi_u$ состояние (полоса Вернера) излучает на 4-й колебательный уровень нижнего состояния, $B^1\Sigma_u^+$ состояние на 10 колебательный уровень. Колебательный обмен и поступательная релаксация не успевают расселять эти уровни. Это приводит к уменьшению эффективной частоты излучения и уменьшает мощность излучения, особенно во втором пике. Если увеличить потери в электрической цепи, интенсивность второго пика еще более уменьшится.

На рис. 3 представлены зависимости эффективности ВУФ излучения от запасенной в конденсаторе и от вложенной в разряд энергии как с учетом, так и без учета пленения излучения.

Таким образом в работе показано, что сильноточный импульсный разряд низкого давления в водороде может служить мощным источником ВУФ излучения в диапазоне длин волн 120–160 нм с КПД до 15% и оценено влияние на излучение пленения и ряда других факторов, что позволит оптимизировать проектируемые источники излучения.

Работа поддержана грантом РФФИ № 12-02-01236.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ю. К. Бобров, Н. Г. Гусейн-заде, А. А. Рухадзе, Ю. В. Юргеленас, *Физические модели и механизмы электрического пробоя газов* (М., Изд. МГУ, 2011).
- [2] А. В. Демьянов, Н. А. Дятко, И. В. Кочетов и др., Физика плазмы **11**, 361 (1985).
- [3] А. В. Демьянов, Н. А. Дятко, И. В. Кочетов и др., Физика плазмы **12**, 623 (1986).
- [4] А. В. Демьянов, Н. А. Дятко, И. В. Кочетов и др., ЖТФ **58**, 75 (1988).
- [5] В. Е. Гальцев, А. В. Демьянов, В. Г. Певгов, В. Ф. Шарков, Препринт ИАЭ-3156, 1979.
- [6] Н. А. Дятко, И. В. Кочетов, А. П. Напартович, М. Д. Таран, ТВТ **22**, 1048 (1984).
- [7] A. J. Dixon, M. F. A. Harrison, A. C. H. Smith, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **9**, 2617 (1976).
- [8] Б. М. Смирнов, *Ионы и возбужденные атомы в плазме* (М., Атомиздат, 1974).

Поступила в редакцию 27 декабря 2012 г.