

Численное моделирование люминесценции молекулярного водорода в сильноточном импульсном разряде

Гочелашвили К.С. (knst@kapella.gpi.ru) (1), Демьянов А.В.(2),

Евдокимова О.Н. (1), Земсков М. Е.(1), Кочетов И.В. (2),

Макаренко Г.Ф.(1)

(1) Институт Общей Физики им. А. М. Прохорова РАН,

(2) ТРИНИТИ

Введение

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.

Известно, что в этом диапазоне длин волн молекулярный водород имеет полосы люминесценции (полосы Лаймана и Вернера). Квантовый к.п.д. 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.

Одним из способов осуществления сильноточного широкоапертурного самостоятельного разряда является применение пучка убегающих электронов [1] для создания предварительной ионизации газа.

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию люминесценции молекулярного водорода в ВУФ области спектра при возбуждении в самостоятельном сильноточном импульсном разряде.

Теоретическая модель

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. Для колебательной кинетики использована упрощенная модель [2-4] с эффективными константами VV обмена, позволяющая уменьшить число необходимых вычислений.

Однородная модель самостоятельного разряда в смесях H_2 -Ar и H_2 -He позволяет предсказать эволюцию тока разряда в этих смесях вплоть до контракции разряда. В численной модели разряда для смеси H_2 -He учитываются процессы электронной, ионно-молекулярной и колебательной кинетики, приведенные в таблице. Для описания

самостоятельного разряда модель учитывает процессы ступенчатой ионизации. Сечения этих процессов пересчитаны из сечения ионизации H_2 с использованием эмпирической формулы [5].

Также в модель включены помимо переходов в полосах Лаймана $V^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ (140-165 нм) и Вернера $C^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ (116-130 нм) радиационные процессы, рассеивающие 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 $V^1\Sigma_u^+$ 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, а линии Вернера 4 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 пленения от населенности колебательных состояний $X^1\Sigma_g^+$ терма H_2 . 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.

Процессы электронной, ионной, колебательной и радиационной кинетики в плазме H_2 -He.

	Процесс	Константы, (cm^3/c cm^6/c , c^{-1})
Реакции с участием электронов		
1	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/b3 + E \leftrightarrow H + H + E$	УБ
2	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/a3 + E$	УБ
3	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/c3 + E$	УБ
4	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/B1 + E$	УБ
5	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/E1 + E$	УБ
6	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/C1 + E$	УБ
7	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/e3 + E$	УБ
8	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/Bs1 + E$	УБ
9	$H_2 + E \leftrightarrow H_2/d3 + E$	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	$H_2/a_3 + E \leftrightarrow H_2/c_1 + E$	УБ
16	$H_2/B_1 + E \leftrightarrow H_2/c_3 + E$	УБ
17	$H_2/c_3 + E \leftrightarrow H_2(+) + E + E$	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
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	$H_2/a_3 + E \leftrightarrow H_2/c_3 + E$	$1 \cdot 10^{-7}, 1 \cdot 10^{-7}$
	Ионно-молекулярные реакции	
39	$HEH(+) + H_2 \rightarrow H_3(+) + HE$	$1 \cdot 10^{-9}$
40	$H_2(+) + H(-) \rightarrow H_2/c_3 + H$	$1 \cdot 10^{-7}$
41	$H_3(+) + H(-) \rightarrow H + H + H + H$	$1 \cdot 10^{-7}$
42	$H_2/c_3 + H \rightarrow H_3(+) + E$	$1 \cdot 10^{-10}$
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	$H(2S) + HE \leftrightarrow H(2P) + HE$	$1 \cdot 10^{-10}, 1 \cdot 10^{-10}$

58	$H_2(V=1) + H_2(V=1) \rightarrow H_2 + H_2(V=2)$	$3 \cdot 10^{-12}$
59	$H_2(V=2) + H_2(V=2) \rightarrow H_2(V=1) + 2(V=3)$	$1.2 \cdot 10^{-11}$
60	$H_2(V=3) + H_2(V=3) \rightarrow H_2(V=2) + 2(V=4)$	$2.7 \cdot 10^{-11}$
61	$H_2(V=4) + H_2(V=4) \rightarrow H_2(V=3) + H_2(V=5)$	$4.8 \cdot 10^{-11}$
62	$H_2(V=5) + H_2(V=5) \rightarrow H_2(V=4) + H_2(V=6)$	$7.5 \cdot 10^{-11}$
63	$H_2(V=6) + H_2(V=6) \rightarrow H_2(V=5) + H_2(V=7)$	$1.08 \cdot 10^{-10}$
64	$H_2(V=7) + H_2(V=7) \rightarrow H_2(V=6) + H_2(V=8)$	$1.47 \cdot 10^{-10}$
65	$H_2(V=8) + H_2(V=8) \rightarrow H_2(V=7) + H_2(V=9)$	$1.92 \cdot 10^{-10}$
66	$H_2(V=9) + H_2(V=9) \rightarrow H_2(V=8) + H_2(V=10)$	$2.43 \cdot 10^{-10}$
67	$H_2(V=10) + H_2(V=10) \rightarrow H_2(V=9) + H + H$	$3 \cdot 10^{-10}$
68	$H_2(V=1) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2$	$3.9 \cdot 10^{-16}$
69	$H_2(V=2) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=1)$	$6.1 \cdot 10^{-16}$
70	$H_2(V=3) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=2)$	$9.6 \cdot 10^{-16}$
71	$H_2(V=4) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=3)$	$1.5 \cdot 10^{-15}$
72	$H_2(V=5) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=4)$	$2.5 \cdot 10^{-15}$
73	$H_2(V=6) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=5)$	$4 \cdot 10^{-15}$
74	$H_2(V=7) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=6)$	$6.5 \cdot 10^{-15}$
75	$H_2(V=8) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=7)$	$1.1 \cdot 10^{-14}$
76	$H_2(V=9) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=8)$	$1.8 \cdot 10^{-14}$
77	$H_2(V=10) + H_2 \rightarrow H_2 + H_2(V=9)$	$2.8 \cdot 10^{-14}$
Излучательные процессы		
78	$H_2/C1 \rightarrow F120 + H_2(V=4)$	$1.67 \cdot 10^9$
79	$H_2/B1 \rightarrow F150 + H_2(V=10)$	$1.25 \cdot 10^9$
80	$H_2/Bs1 \rightarrow F91 + H_2$	$1.25 \cdot 10^9$
81	$H_2/d3 \rightarrow Fik + H_2/a3$	$9.1 \cdot 10^7$
82	$H_2/e3 \rightarrow Fik + H_2/a3$	$9.1 \cdot 10^7$
83	$H_2/a3 \rightarrow Fik + H_2/b3$	$9.1 \cdot 10^7$

“УБ” означает, что константы получены из уравнения Больцмана.

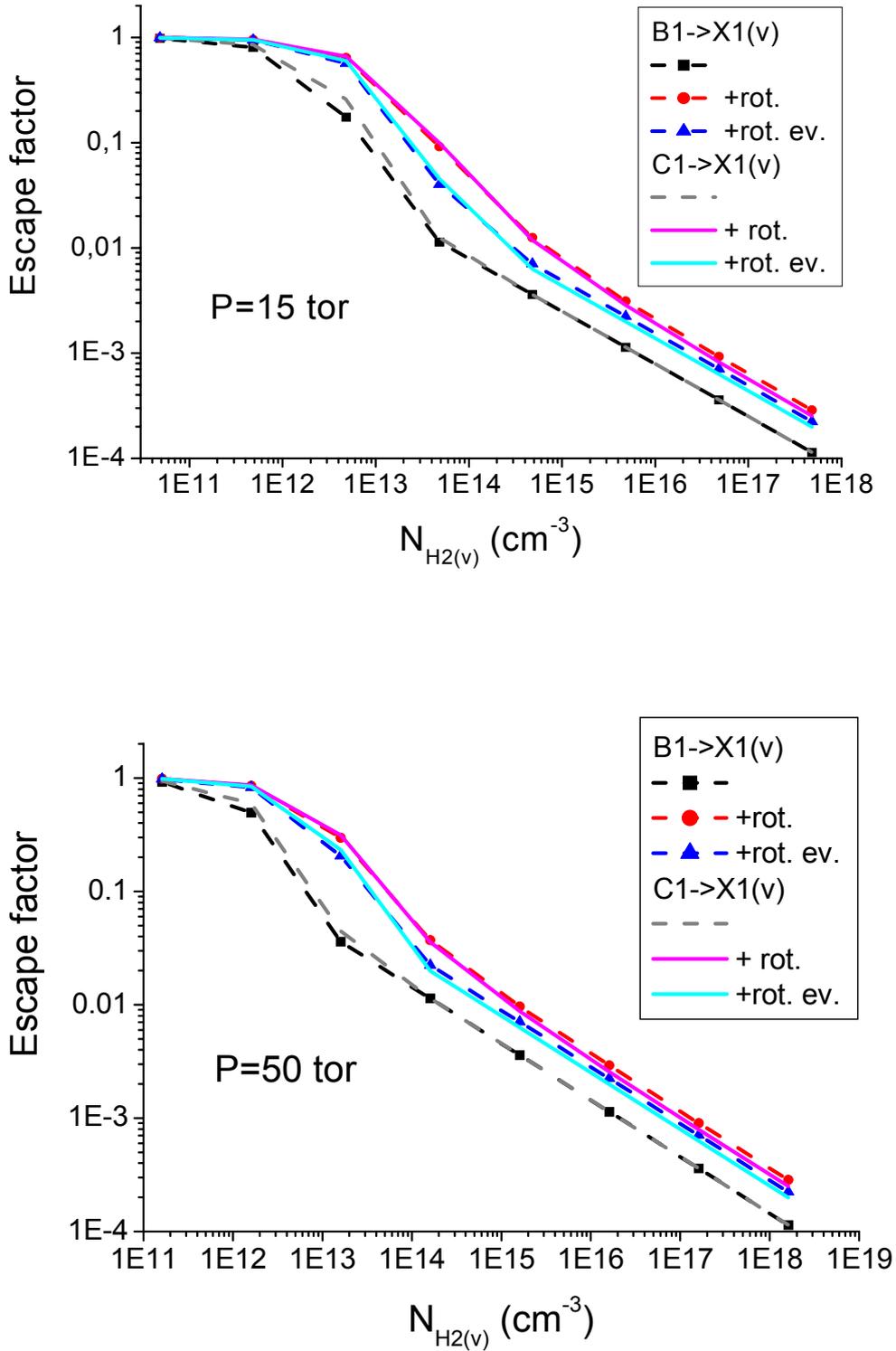


Рис.1. Зависимость вероятности того, что фотон пройдет расстояние R не поглотившись от населенности колебательного уровня v $X^1\Sigma$ состояния H_2 ($v=4$ для $C^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma(v)$ и $v=10$ для $B^1\Sigma \rightarrow X^1\Sigma(v)$ перехода). Смесь $H_2:He=1:3$, давление 15 и 50 торр. $R=0.7$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

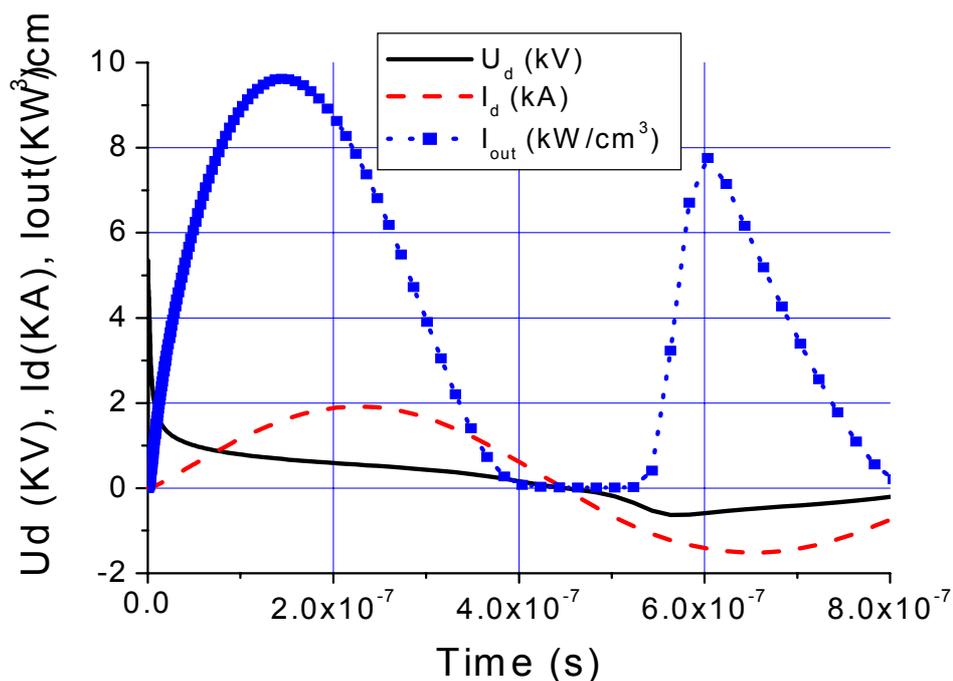


Рис.2. Расчетные зависимости импульса ВУФ излучения, напряжения и тока разряда. Смесь $\text{N}_2:\text{He}=1:3$, давление 50 торр, $U_{c0}=5\text{kB}$, $C=0.6 \cdot 10^{-7}$ Ф. Расчет без учета пленения излучения.

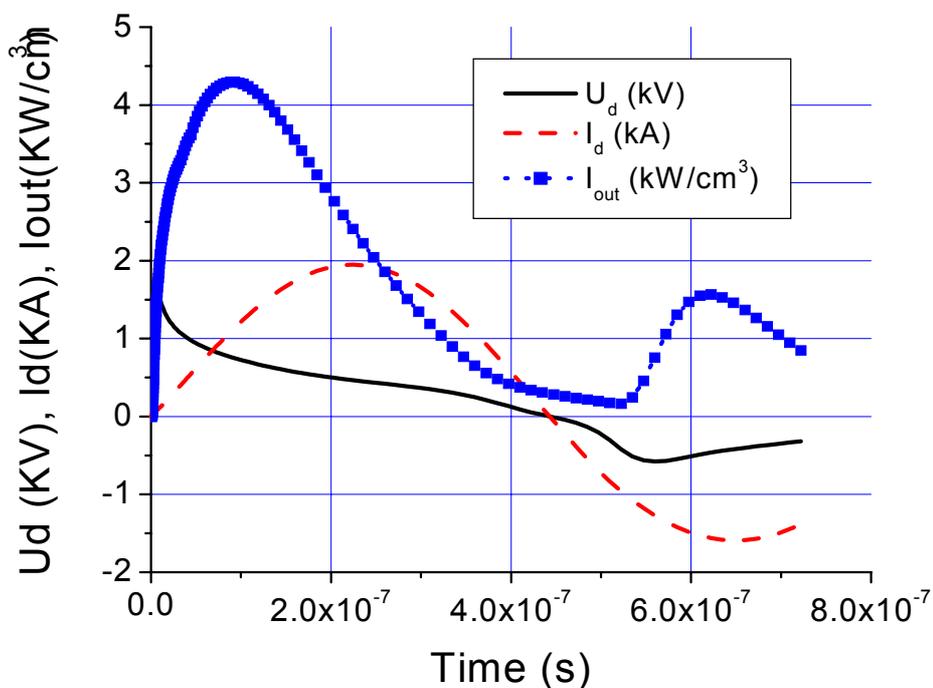


Рис.3. Расчетные зависимости импульса ВУФ излучения, напряжения и тока разряда. Смесь $\text{N}_2:\text{He}=1:3$, давление 50 торр, $U_{c0}=5\text{kB}$, $C=0.6 \cdot 10^{-7}$ Ф. Расчет с учетом пленения излучения.

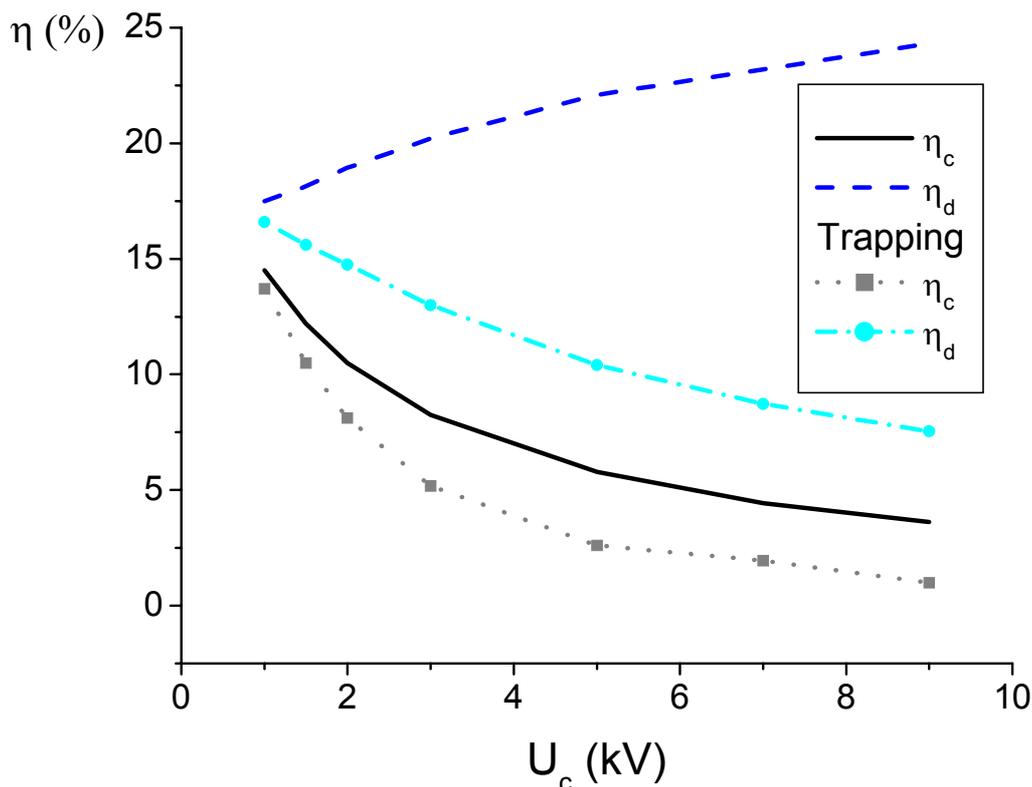


Рис.4. Зависимость эффективности ВУФ излучения по запасенной энергии (η_c) и по вложенной в газ энергии (η_d) от зарядного напряжения. Смесь $H_2:He=1:3$, давление 15 торр, $U_{c0}=5kV$, $C=0.6 \cdot 10^{-7}$ Ф. Расчеты как с учетом пленения излучения (линии с символами) так и без учета (линии без символов).

Результаты моделирования и обсуждения

Теоретическая модель была использована для моделирования ВУФ излучения в полосах Лаймана и Вернера импульсного сильноточного разряда в смесях водорода с гелием. Электрическая цепь моделируется LC контуром, с параметрами $L=300$ нГ, $C=0,6$ мкФ. Результаты расчетов приведены на Рис. 2 без учета и Рис.3 с учетом пленения излучения. На рисунках приводится суммарная интенсивность ВУФ излучения в полосах Лаймана и Вернера. В модели $S^1\Pi_u$ состояние (полоса Вернера) излучает на 4-ый колебательный уровень нижнего состояния, $V^1\Sigma_u^+$ состояние на 10 колебательный уровень. Колебательный обмен и поступательная релаксация не успевают расселять эти уровни. Поэтому излучение ими поглощается, что 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.4. 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 к.п.д. до 15%.

Работа поддержана грантом РФФИ № 05-02-17484.

Литература

1. Бабич Л. П., УФН, **175**, №10, 1069, (2005)
2. Демьянов А. В., Дятко Н. А., Кочетов И. В. и др. Физика плазмы, **11**, 361, (1985).
3. Демьянов А. В., Дятко Н. А., Кочетов И. В. и др. Физика плазмы, **12**, 623, (1986).
4. Демьянов А. В., Дятко Н. А., Кочетов И. В. и др. ЖТФ, **58**, 75, (1988).
5. Смирнов Б. М. Ионы и возбужденные атомы в плазме. М., Атомиздат, (1974).